

Universidade Federal do Paraná  
Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental

Lucas Emilio Bernardelli Hoeltgebaum

**Modelagem do Ciclo de Carbono de Reservatórios**

Curitiba

2016

Universidade Federal do Paraná  
Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental

Lucas Emilio Bernardelli Hoeltgebaum

**Modelagem do Ciclo de Carbono de Reservatórios**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal do Paraná como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Ambiental.

Orientador: Prof. Dr. Maurício Felga  
Gobbi

Curitiba  
2016

---

H694m Hoeltgebaum, Lucas Emilio Bernardelli  
Modelagem do ciclo de carbono de reservatórios / Lucas Emilio  
Bernardelli Hoeltgebaum. – Curitiba, 2016.  
116 f. : il. color. ; 30 cm.

Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia,  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, 2016.

Orientador: Maurício Felga Gobbi .  
Bibliografia: p. 108-113.

1. Efeito Estufa (Atmosfera), 2. Reservatórios - Funil (RJ), 3.  
Reservatórios - Rio Verde (PR). 4. Gases estufa – Brasil – Medição. 5. Ciclos  
Biogeoquímicos. I. Universidade Federal do Paraná. II. Gobbi, Maurício Felga.  
III. Título.

CDD: 363.738740981

---



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO  
Setor TECNOLOGIA  
Programa de Pós Graduação em ENGENHARIA AMBIENTAL  
Código CAPES: 40001016075P3

### TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em ENGENHARIA AMBIENTAL da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Dissertação de Mestrado de **LUCAS EMILIO BERNARDELLI HOELTGEBAUM**, intitulada: "**Modelagem do Ciclo de Carbono de Reservatórios**", após terem inquirido o aluno e realizado a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua aprovação.

Curitiba, 13 de Junho de 2016.

Prof MAURÍCIO FELGA GOBBI  
Presidente da Banca Examinadora (UFPR)

Prof DIANA MARIA CANCELLI

Prof NELSON LUÍS DA COSTA DIAS  
Avaliador Interno (UFPR)

Prof TOBIAS BERNWARD BLENINGER  
Avaliador Interno (UFPR)

# Dedicatória

Dedico este trabalho à minha avó, Gertraude Guthoff, por sua participação efetiva e afetiva em uma parte significativa da minha vida até aqui. Por sua dedicação, incentivo e encorajamento em toda a minha educação!

Obrigado, vó!

Gertraude Guthoff

08/01/1942

15/01/2014

## Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador, Maurício Gobbi, pela direção em momentos pontuais e cruciais deste trabalho, por sempre estar disponível para as dúvidas e por toda a paciência, especialmente nas fases mais críticas deste trabalho, em que sua larga experiência me recolocou nos trilhos várias vezes.

Ao projeto BALCAR, nas figuras do Dr. Jorge Damázio e do Dr. Nelson Dias, pela cessão dos dados de Funil para uso neste trabalho.

A todos os professores do Lemma – Nelson Dias, Maurício Gobbi, Cynara Cunha, Ricardo Almeida e Dornelles Vissotto Jr – e do PPGEA, que mesmo não influenciando neste trabalho estiveram presentes com seu vasto conhecimento de alguma forma durante a fase do mestrado.

Ao Instituto Tecnológico Simepar que financiou minha bolsa nos primeiros meses de mestrado.

Aos colegas e amigos de todos os dias, em especial Fernando Armani, Tomás Chor e Einara Zahn.

À minha família, em especial na figura do meu pai, Paulo Emilio, pelo apoio constante desde a minha decisão por este caminho até os momentos finais.

À minha noiva, Juliana Basso, por toda a paciência e apoio emocional, em especial nos últimos turbulentos meses deste processo e também por sempre apoiar minhas decisões e caminhar ao meu lado em todas elas.

Por último, mas mais importante, a Deus, sem o qual nada neste trabalho, em minha vida ou no Universo seria possível!

# Epígrafe

*“Tudo tem o seu tempo determinado, e há tempo para todo o propósito debaixo do céu.*

*Há tempo de nascer, e tempo de morrer; tempo de plantar, e tempo de arrancar o que se plantou;*

*(...)*

*Tempo de chorar, e tempo de rir; tempo de prantear, e tempo de dançar;*

*(...)*

*Tudo fez formoso em seu tempo; também pôs o mundo no coração do homem, sem que este possa descobrir a obra que Deus fez desde o princípio até o fim.”*

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>20</b>
<b>2</b>	<b>Revisão Bibliográfica</b>	<b>22</b>
2.1	O Efeito Estufa e os GEE's . . . . .	22
2.2	O Papel dos Reservatórios na Emissão de GEE's . . . . .	24
2.2.1	Histórico . . . . .	24
2.2.2	O Que Influencia a Geração de GEE's em Reservatórios? . . . . .	25
2.3	Modelagem de Emissão de GEE's . . . . .	28
<b>3</b>	<b>Metodologia e Fundamentação Teórica</b>	<b>34</b>
3.1	Coefficiente de Difusão Turbulenta e Perfil de Temperatura . . . . .	36
3.2	Balanços na Água . . . . .	38
3.2.1	Análise de Sensibilidade aos Coeficientes do Modelo . . . . .	39
3.2.2	Oxigênio Dissolvido . . . . .	43
3.2.3	Carbono Orgânico Dissolvido . . . . .	47
3.2.4	Carbono Orgânico Particulado . . . . .	48
3.2.5	Carbono Inorgânico/Dióxido de Carbono . . . . .	49
3.2.6	Metano . . . . .	51
3.3	Balanços no Sedimento . . . . .	52
3.3.1	Camada Aeróbia . . . . .	53



3.3.2	Camada Anaeróbia . . . . .	55
3.3.3	Metano . . . . .	56
3.4	Discretização e Solução Numérica . . . . .	58
3.4.1	Condições de Contorno . . . . .	64
<b>4</b>	<b>Aplicações e Resultados</b>	<b>68</b>
4.1	Reservatório de Funil . . . . .	68
4.1.1	Calibração do modelo de temperatura . . . . .	70
4.1.2	Preparação dos dados de entrada para simulações de fluxo de GEE's . . .	78
4.1.3	Simulações . . . . .	81
4.2	Reservatório do Rio Verde . . . . .	95
4.2.1	Dados utilizados . . . . .	95
4.2.2	Simulações . . . . .	99
<b>5</b>	<b>Conclusões e Recomendações</b>	<b>105</b>
<b>A</b>	<b>Considerações sobre o modelo de temperatura</b>	<b>114</b>
A.1	Condição de Contorno . . . . .	114
A.2	Coefficiente de Difusão Turbulenta . . . . .	115
A.3	Discretização e Solução Numérica . . . . .	116

# Lista de Figuras

3.1	Resultados finais nas concentrações de oxigênio dissolvido, dóxido de carbono e metano dissolvido, de acordo com as 20 variações de cada coeficiente . . . . .	41
3.2	Esquema dos processos que ocorrem na coluna d'água . . . . .	42
3.3	Esquema dos processos que ocorrem no sedimento . . . . .	53
3.4	Ordem de prioridade na modelagem de cada espécie pelo método semi-implícito	60
3.5	Estêncil para discretização utilizando o método de diferenças finitas . . . . .	61
3.6	Condições de contorno na superfície (esquerda) e no fundo (direita), com emprego do “ponto-fantasma”, ou fictício . . . . .	66
4.1	Localização do reservatório de Funil, Estado do Rio de Janeiro . . . . .	69
4.2	Temperatura na água medida em várias profundidades no período de 01/06/2011 a 31/05/2012, para o reservatório de Funil . . . . .	70
4.3	Temperatura na água medida em várias profundidades no período de 01/04/2012 a 31/12/2013, no reservatório de Funil . . . . .	72
4.4	Variáveis meteorológicas utilizadas como forçantes para calibração do modelo de temperatura no período de 01/04/2012 a 31/12/2013 . . . . .	73
4.5	Curva cota/área, pontos extrapolados e polinômio ajustado para o reservatório de Funil . . . . .	74
4.6	Temperatura na água medida e simulada em várias profundidades no período de 01/04/2012 a 31/12/2013, utilizando os melhores parâmetros de calibração possíveis . . . . .	75

4.7	Perfis de temperatura na água medida e simulada para algumas datas no período de 01/04/2012 a 31/12/2013, utilizando os melhores parâmetros de calibração possíveis . . . . .	76
4.8	Correlações para as temperatura na água medida e simulada nas profundidades 4,32, 9,17 e 19,17 m no período de 01/04/2012 a 31/12/2013, utilizando os melhores parâmetros de calibração possíveis . . . . .	77
4.9	Variáveis meteorológicas utilizadas como forçantes para as simulações no período de 01/06/2011 a 31/05/2012 . . . . .	79
4.10	Vazão afluyente e defluente no reservatório no período de 01/06/2011 a 31/05/2012	80
4.11	Pontos de coleta das campanhas no reservatório de Funil . . . . .	81
4.12	Concentrações na entrada do reservatório (FL10) no período de 01/06/2011 a 31/05/2012 . . . . .	82
4.13	Fluxos de CO <sub>2</sub> e CH <sub>4</sub> medidos no período de 01/06/2011 a 31/05/2012 . . . . .	85
4.14	Perfis de temperatura e concentrações de oxigênio dissolvido, carbono orgânico particulado lábil e refratário, carbono orgânico dissolvido, CO <sub>2</sub> dissolvido e CH <sub>4</sub> dissolvido simulados para o período de 01/06/2011 a 31/05/2012 no reservatório de Funil . . . . .	87
4.15	Concentrações simuladas de COD, COP lábil e refratário, CO <sub>2</sub> e CH <sub>4</sub> dissolvidos nos sedimento aeróbio (Sed. 1) e anaeróbio (Sed. 2) para o reservatório de Funil	88
4.16	Temperatura e concentrações médias simuladas na água de OD, COD, COP lábil e refratário, CO <sub>2</sub> e CH <sub>4</sub> para o reservatório de Funil . . . . .	89
4.17	Fluxos de CO <sub>2</sub> e CH <sub>4</sub> da água para a atmosfera e do sedimento para a água para o reservatório de Funil. . . . .	90
4.18	Fluxos de CO <sub>2</sub> da água para a atmosfera e do sedimento para a água comparados aos valores medidos para o reservatório de Funil. . . . .	91
4.19	Fluxos de CH <sub>4</sub> da água para a atmosfera e do sedimento para a água comparados aos valores medidos para o reservatório de Funil. . . . .	92
4.20	Consumo de metano obtido pelo modelo no reservatório de Funil . . . . .	93

4.21	.....	94
4.22	Reservatório do Rio Verde .....	95
4.23	Variáveis meteorológicas utilizadas como forçantes para as simulações no período de 01/03/2010 a 31/10/2010 para o reservatório do Rio Verde .....	96
4.24	Vazão afluyente e defluente no reservatório do Verde no período de 01/03/2010 a 31/10/2010 .....	97
4.25	Perfis de temperatura na água medida e simulada no período de 03/2010 a 12/2010 no reservatório do Rio Verde .....	98
4.26	Perfis de temperatura e concentrações de oxigênio dissolvido, carbono orgânico particulado lábil e refratário, carbono orgânico dissolvido, CO <sub>2</sub> dissolvido e CH <sub>4</sub> dissolvido simulados para o período de 03/2010 a 10/2010 no reservatório do Rio Verde .....	101
4.27	Concentrações simuladas de COD, COP lábil e refratário, CO <sub>2</sub> e CH <sub>4</sub> dissolvidos nos sedimento aeróbio (Sed. 1) e anaeróbio (Sed. 2) para o reservatório do Verde	102
4.28	Temperatura e concentrações médias simuladas na água de OD, COD, COP lábil e refratário, CO <sub>2</sub> e CH <sub>4</sub> para o reservatório do Verde .....	102
4.29	Fluxos de CO <sub>2</sub> e CH <sub>4</sub> da água para a atmosfera para o reservatório do Verde ..	103
4.30	Consumo de metano obtido pelo modelo no reservatório do Verde .....	103
4.31	.....	104

# Lista de Tabelas

3.1	Coeficientes para reações na água, contidos no modelo proposto por Hoeltgebaum e Gobbi (2015) e Brasil (2014). . . . .	40
4.1	Valores típicos para os parâmetros, constantes e coeficientes nas equações da água e do sedimento. . . . .	86

# Lista de Símbolos

Em ordem alfabética (letras gregas ao final)

$A$	$m^2$	Área do reservatório
$A_s$	$m^2$	Área do sedimento
$b$	mg	Massa das plantas enraizadas
$c_p$	$J Kg^{-1} °C^{-1}$	Calor específico da água
$C_b$	$mg m^{-3}$	Concentração de matéria orgânica refratária
$C_{1sed1}$	$mg m^{-3}$	Concentração de carbono orgânico no sedimento aeróbio
$C_{1sed2}$	$mg m^{-3}$	Concentração de carbono orgânico no sedimento anaeróbio
$C_{2sed1}$	$mg m^{-3}$	Conc. de carb. orgân. particulado lábil no sedimento aeróbio
$C_{2sed2}$	$mg m^{-3}$	Conc. de carb. orgân. particulado lábil no sedimento anaeróbio
$C_{3sed1}$	$mg m^{-3}$	Conc. de carb. orgân. particulado refratário no sedimento aeróbio
$C_{3sed2}$	$mg m^{-3}$	Conc. de carb. orgân. particulado refratário no sedimento anaeróbio
$C_{I sed1}$	$mg m^{-3}$	Concentração de $CO_2$ no sedimento aeróbio
$C_{I sed2}$	$mg m^{-3}$	Concentração de $CO_2$ no sedimento anaeróbio
$C_{M sed1}$	$mg m^{-3}$	Concentração de $CH_4$ no sedimento aeróbio
$C_{M sed2}$	$mg m^{-3}$	Concentração de $CH_4$ no sedimento anaeróbio
$C_{C_{1w}}$	$mg m^{-3}$	Concentração de carbono orgânico dissolvido na água
$C_{C_{2w}}$	$mg m^{-3}$	Concentração de carbono orgânico particulado lábil na água
$C_{C_{3w}}$	$mg m^{-3}$	Concentração de carbono orgânico particulado refratário na água
$C_{C_{Iw}}$	$mg m^{-3}$	Concentração de carbono inorgânico na água
$C_{C_{I sat}}$	$mg m^{-3}$	Concentração de saturação de $CO_2$
$C_{C_{I sed1}}$	$mg m^{-3}$	Concentração de $CO_2$ no sedimento aeróbio
$C_l$	$mg m^{-3}$	Concentração de matéria orgânica lábil

$C_{M_w}$	$\text{mg m}^{-3}$	Concentração de metano dissolvido na água
$C_{N_w}$	$\text{mg m}^{-3}$	Concentração de nitrogênio na água
$C_{M_{sat}}$	$\text{mg m}^{-3}$	Concentração de saturação de metano
$C_{O_{sat}}$	$\text{mg m}^{-3}$	Concentração de saturação de oxigênio
$C_{O_{sat,P}}$	$\text{mg m}^{-3}$	Concentração de saturação de oxigênio função da pressão
$C_{O_{sat,S}}$	$\text{mg m}^{-3}$	Concentração de saturação de oxigênio função da salinidade
$C_{O_{sat,T}}$	$\text{mg m}^{-3}$	Concentração de saturação de oxigênio função da temperatura
$C_{M_{sed1}}$	$\text{mg m}^{-3}$	Concentração de metano no sedimento aeróbio
$C_{O_{sed1}}$	$\text{mg m}^{-3}$	Concentração de oxigênio dissolvido no sedimento aeróbio
$C_{O_w}$	$\text{mg m}^{-3}$	Concentração de oxigênio dissolvido na água
$C_{P_w}$	$\text{mg m}^{-3}$	Concentração de fitoplâncton na água
$C_\chi$	$\text{mg m}^{-3}$	Concentração de uma substância qualquer $\chi$
$C_{\chi_{in}}$	$\text{mg m}^{-3}$	Concentração afluyente de uma substância qualquer $\chi$
$D_P$	$\text{dia}^{-1}$	Taxa de consumo de oxigênio (morte) pelo fitoplâncton
$D_{P_1}$	$\text{dia}^{-1}$	Taxa de perda do fitoplâncton por respiração e excreção
$D_{P_{1,20}}$	$\text{dia}^{-1}$	Taxa de perda do fitoplâncton por respiração e excreção a 20 °C
$D_{P_2}$	$\text{dia}^{-1}$	taxa de mortalidade do fitoplâncton
$f$	dia	Foto-período
$f_1$	1	Fração volumétrica aeróbia da camada ativa de solo
$f_2$	1	Fração volumétrica anaeróbia da camada ativa de solo
$f_{bs}$	1	Fração da biomassa das plantas
$f_{bL}, f_{bR}, f_{bD}$	1	Frações da biomassa produzidas pela mortes das plantas
$G_{20}$	$\text{dia}^{-1}$	Taxa de crescimento do fitoplâncton a 20 °C
$G(I)$	1	Efeito da radiação no crescimento do fitoplâncton
$G(N)$	1	Efeito dos nutrientes no crescimento do fitoplâncton
$G(T)$	$\text{dia}^{-1}$	Efeito da temperatura no crescimento do fitoplâncton
$G_P$	$\text{dia}^{-1}$	Taxa de produção de oxigênio pelo fitoplâncton
$H_s$	$\text{W m}^{-2}$	Radiação de onda curta absorvida pelo corpo d'água
$I_a$	$\text{W m}^{-2}$	Intensidade da luz
$I_s$	$\text{W m}^{-2}$	Intensidade ótima da luz
$k_{d_1}$	$\text{dia}^{-1}$	Taxa de consumo aeróbio de carbono orgânico

$k_{d1,20}$	$\text{dia}^{-1}$	Taxa de consumo aeróbio de carbono orgânico a 20 °C
$k_{db}$	$\text{dia}^{-1}$	Taxa de morte das plantas enraizadas no sedimento
$k_{hid2}$	$\text{dia}^{-1}$	Taxa de hidrólise do carbono orgânico lábil
$k_{hid3}$	$\text{dia}^{-1}$	Taxa de hidrólise do carbono orgânico refratário
$k_{lix2}$	$\text{dia}^{-1}$	Taxa de lixiviação de matéria orgânica lábil
$k_{lix3}$	$\text{dia}^{-1}$	Taxa de lixiviação de matéria orgânica refratária
$k_{M1}$	$\text{dia}^{-1}$	Taxa de consumo anaeróbio de carbono orgânico
$k_{M1,20}$	$\text{dia}^{-1}$	Taxa de consumo anaeróbio de carbono orgânico a 20 °C
$k_M$	$\text{dia}^{-1}$	Taxa de consumo aeróbio de metano
$k_{M,20}$	$\text{dia}^{-1}$	Taxa de consumo aeróbio de metano a 20 °C
$k_{Iar}$	$\text{m s}^{-1}$	Velocidade de reaeração do CO <sub>2</sub>
$k_{Mar}$	$\text{m s}^{-1}$	Velocidade de reaeração do metano
$k_{Oar}$	$\text{m s}^{-1}$	Velocidade de reaeração do oxigênio
$k_{Iws}$	$\text{m s}^{-1}$	Velocidade de troca de CO <sub>2</sub> do sedimento com a coluna d'água
$k_{Mws}$	$\text{m s}^{-1}$	Velocidade de troca de metano do sedimento com a coluna d'água
$k_{Ows}$	$\text{m s}^{-1}$	Velocidade de troca de OD do sedimento com a coluna d'água
$K_e$	$\text{m}^{-1}$	Coefficiente de extinção da luz
$K_H$	$\text{m}^2\text{s}^{-1}$	Coefficiente de difusão turbulenta
$K_{Hd}$	$\text{mg m}^{-3}$	Constante de meia saturação para o consumo de carbono orgânico
$K_{Hen}$	$\text{mol l}^{-1}\text{atm}^{-1}$	Coefficiente de Henry
$K_{HM}$	$\text{mg m}^{-3}$	Constante de meia saturação para o consumo de metano
$l_1$	$\text{m}$	Espessura da camada aeróbia de sedimento
$l_2$	$\text{m}$	Espessura da camada anaeróbia de sedimento
$p_{\text{CO}_2}$	$\text{atm}$	Pressão parcial do CO <sub>2</sub>
$Q_{ent}$	$\text{m}^3 \text{s}^{-1}$	Vazão afluyente ao reservatório
$Q_{sai}$	$\text{m}^3 \text{s}^{-1}$	Vazão defluyente ao reservatório
$r_{ca}$	$\text{mgC mgCl}^{-1}$	razão estequiométrica entre oxigênio e clorofila <i>a</i>
$r_{oc}$	$\text{mgO}_2 \text{mgC}^{-1}$	razão estequiométrica entre oxigênio e carbono
$r_{on}$	$\text{mgO}_2 \text{mgN}^{-1}$	razão estequiométrica entre oxigênio e nitrogênio
$R$	$\text{m}^3 \text{Pa K}^{-1} \text{mol}^{-1}$	Constante universal dos gases
$R_{C1w}$	$\text{mg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Fontes e sumidouros de carbono orgânico dissolvido



$R_{C_{2w}}$	$\text{mg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Fontes e sumidouros de carbono orgânico particulado lábil
$R_{C_{3w}}$	$\text{mg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Fontes e sumidouros de carbono orgânico particulado refratário
$R_{C_{Iw}}$	$\text{mg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Fontes e sumidouros de carbono inorgânico
$R_{C_{Mw}}$	$\text{mg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Fontes e sumidouros de metano
$R_{O_w}$	$\text{mg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Fontes e sumidouros de oxigênio dissolvido
$R_{\chi}$	$\text{mg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Fontes e sumidouros de uma substância qualquer $\chi$
$S$	$\text{g l}^{-1}$	Salinidade
$S_{ch}$	1	Número de Schmidt
$S_B$	1	Solubilidade de Bunsen
$t$	s	Tempo
$T$	$^{\circ}\text{C}$	Temperatura da água
$T_a$	K	Temperatura absoluta da água
$v_b$	$\text{m dia}^{-1}$	Velocidade de enterramento
$v_{sed}$	$\text{m}^3$	Velocidade de sedimentação da matéria orgânica
$V$	$\text{m}^3$	Volume do reservatório
$V_{s1}$	$\text{m}^3$	Volume do sedimento aeróbio
$V_{s2}$	$\text{m}^3$	Volume do sedimento anaeróbio
$w_{10}$	$\text{m s}^{-1}$	Velocidade do vento a 10 metros de altura
$z$	m	Profundidade
$Z_{sl}$	km	Altitude do reservatório
$\beta_{D1}, \beta_{M1}$	$\text{m dia}^{-1}$	Taxas difusivas entre a água e o sedimento aeróbio
$\beta_{D2}, \beta_{M2}$	$\text{m dia}^{-1}$	Taxas difusivas entre o sedimento aeróbio e anaeróbio
$\theta_{\gamma}$	1	Fator de correção da variável $\gamma$
$\phi$	1	Porosidade do sedimento
$\rho_w$	$\text{kg m}^{-3}$	Densidade da água a 25 $^{\circ}\text{C}$

# Lista de Siglas

GEE('s) Gas(es) de Efeito Estufa

IPCC Painel Intergovernamental sobre Mudanças Climáticas

## Resumo

Propõe-se neste trabalho um modelo para estimativa de emissões de gases de efeito estufa ( $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$ ) por reservatórios de usinas hidrelétricas. O modelo foi construído baseando-se nas relações do ciclo do carbono na coluna d'água e no sedimento, focando-se nas concentrações de carbono orgânico particulado (lábil e refratário), dissolvido, oxigênio dissolvido, carbono inorgânico e metano. A modelagem foi construída considerando-se as variações verticais de temperatura e concentrações dos compostos deste ciclo na coluna d'água e de forma média (concentrada) nas duas camadas de sedimento (aeróbia e anaeróbia). Nas simulações realizadas para os reservatórios de Funil (RJ) e do Rio Verde (PR) foi possível se obter bons resultados para os perfis de temperatura e concentração dos compostos na coluna d'água, além de resultados coerentes nas emissões de  $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$  para a atmosfera, apesar de não terem sido idênticos aos valores medidos em campo. Para o reservatório de Funil, foram obtidos alguns valores de fluxos de  $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$  muito próximos aos medidos em campo, mas não em todo o período de simulação e eventualmente na mesma ordem de grandeza para emissões de  $\text{CH}_4$  no sedimento. Para ambos os reservatórios foram obtidos resultados de fluxos em faixas de valores muito próximas, mesmo possuindo características muito diferentes de vazão e área/volume total, além de resultados de consumo de metano na oxiclina próximos ao comportamento observado em campo em outros lagos.

Palavras Chave: Emissão de Gases de Efeito Estufa, Reservatórios, Modelo Unidimensional, Ciclo Biogeoquímico, Modelagem Ambiental

## Abstract

In this work we propose a model for greenhouse gas emissions from reservoirs. The model is based on equations for carbon balance within the water column and the sediment bed. Specifically the model considers concentrations of refractory and labile particulate organic carbon, dissolved organic carbon, dissolved oxygen, carbon dioxide, and methane. The model considers vertical concentration variation, and vertical temperature variation for stratification and mixing in the water column, and considers two sediment layers for the reservoir bed. The model was applied to two very different reservoirs (Verde and Funil) in Brazil, and was able to reproduce quite well the temperature changes within the water bodies, and predicted emissions of CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> which are at least within what is expected from water quality type models in terms of errors compared to measured data, despite the fact that no calibration was performed and literature values were used for coefficients. Methane consumption near the thermocline was also predicted by the model which agrees with observed data.

Keys: Greenhouse Effect Gases Emission, Reservoirs, Unidimensional Model, Biogeochemistry Cycle, Environmental Modelling

# Capítulo 1

## Introdução

Devido à demanda, cada vez maior, por recursos energéticos que supram as necessidades humanas, muito se tem debatido sobre as formas de sua obtenção e suas influências sobre o meio ambiente.

A população mundial ainda possui grande dependência de energia oriunda da queima de combustíveis fósseis, que possuem vários efeitos danosos de caráter local e global. Sabendo-se que a maioria destes combustíveis não é renovável, a procura por outras matrizes energéticas se tornou imperativa.

A energia hidrelétrica sempre foi considerada renovável e com poucos impactos ambientais sensíveis a longo prazo, além de ser de baixo custo em países como o Brasil, em que se pode aproveitar a grande disponibilidade de recursos hídricos. No entanto, recentemente muito se tem questionado sobre o papel das hidrelétricas no que diz respeito à emissão de gases de efeito estufa (GEE's).

A emissão de GEE's por fontes antropogênicas pode intensificar o efeito estufa natural ao aumentar as concentrações destes gases na atmosfera, e cada vez mais tem-se levado em conta o quanto é válido lançar mão de tecnologias para obtenção de energia que possam causar este efeito, mesmo com baixo custo financeiro.

As discussões e estudos realizados até aqui são todos em lagos já existentes, em que infelizmente há pouco o que se fazer no sentido de prevenir impactos. No entanto, o conhecimento científico adquirido poderá ser aplicado em estudos futuros, que nos permitam

prever as consequências da construção de novas usinas realizar, se necessário, ações prévias de mitigação dos impactos.

O objetivo deste trabalho é desenvolver um modelo capaz de representar os processos biogeoquímicos do ciclo do carbono na água e no sedimento de um reservatório, discretizado ao longo de sua profundidade a fim de se quantificar, como produto final, os fluxos dos dois principais gases do efeito estufa antropogênico, o dióxido de carbono e o metano.

No capítulo 2 são introduzidas e fundamentadas as questões relacionadas à intensificação do efeito estufa, à emissão pelos reservatórios dos gases causadores deste efeito, além de uma revisão dos trabalhos já realizados sob esta ótica e alguns modelos existentes.

No capítulo 3 é descrita a forma de trabalho para se chegar ao modelo pretendido, os passos utilizados e quais equações fundamentam o produto final desta dissertação. Esta parte é separada em quatro seções: (i) a descrição do modelo utilizado e adaptado para simulação dos perfis de temperatura; as equações que descrevem os balanços das espécies modeladas para (ii) a coluna d'água e (iii) o sedimento; (iv) a forma de discretização e a solução numérica utilizada.

No capítulo 4 o modelo é aplicado para simular as emissões nos reservatórios de Funil (RJ) e do Rio Verde (PR) e compará-las a dados disponíveis. No capítulo 5 são apresentadas as conclusões e recomendações para trabalhos futuros.

# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

### 2.1 O Efeito Estufa e os GEE's

O efeito estufa é um fenômeno natural no planeta Terra, que ocorre devido ao “aprisionamento” de ondas radiativas longas, entre elas o infravermelho que é sensível na forma de calor, fazendo assim com que a temperatura média no planeta possa ser mantida relativamente constante e amena. Este aprisionamento é devido a características específicas de certos gases, como o dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), metano ( $\text{CH}_4$ ), óxido nitroso ( $\text{N}_2\text{O}$ ), ozônio ( $\text{O}_3$ ) e vapor d'água.

Estes gases (juntamente com outros gases-traço) formam aproximadamente 1% da composição da atmosfera, ou seja, muito pouco frente aos 78% do nitrogênio ( $\text{N}_2$ ) e 21% de oxigênio ( $\text{O}_2$ ). No entanto, se fosse constituída apenas por estes dois últimos, a temperatura média da Terra seria 21 °C mais baixa do que os atuais 15 °C (Houghton, 1997).

De toda a energia proveniente do Sol — que vem através de comprimentos de onda ( $\lambda$ ) na faixa do visível (entre 0,4 e 0,75  $\mu\text{m}$ ), ultra-violeta (UV, com  $\lambda$  menor que 0,4  $\mu\text{m}$ ) e infravermelho (IV, com  $\lambda$  entre 0,8 e 3  $\mu\text{m}$ ) — aproximadamente 50% é absorvida pela superfície terrestre. Da outra metade, 30% são refletidos ao espaço por superfícies como gelo, areia, neve, água, entre outras e 20% é absorvida pela atmosfera, sendo o UV na estratosfera por gases como ozônio ( $\text{O}_3$ ) e oxigênio e o IV por dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) e vapor d'água (Baird, 2002).

O que ocorre de especial com estes gases é que eles possuem a capacidade de absorver a

radiação infravermelha (entre 4 e 50  $\mu\text{m}$ ) vinda da superfície terrestre e em seguida reemiti-la em direções aleatórias, onde uma parte prossegue para o espaço e outra retorna à Terra.

Certos gases absorvem energia devido às vibrações nas ligações químicas entre os átomos da molécula em certas frequências. Se esta vibração ocorrer exatamente na mesma frequência que a onda eletromagnética que atinge a molécula, então esta a absorve. Na verdade, para certos gases não é necessário um único valor de frequência de vibração, mas sim uma certa faixa de valores (Baird, 2002).

Existem dois tipos de vibrações nas ligações: as de estiramento e as de deformação angular. A maioria dos gases com este tipo de vibração possui frequências na região do infravermelho térmico. Moléculas de  $\text{O}_2$  e  $\text{N}_2$  não absorvem radiação infravermelha, pois suas vibrações de estiramento produzem um momento dipolar igual a zero. Já o  $\text{CO}_2$ , durante as oscilações de estiramento assimétrico e de deformação angular, permite a absorção desta radiação. Entre os comprimentos de onda de 14 e 16  $\mu\text{m}$ , metade da absorção de IV térmico é devida ao  $\text{CO}_2$ .

O metano também absorve IV térmico, em torno de 7,7  $\mu\text{m}$ , e o incremento de uma molécula de  $\text{CH}_4$  causa o mesmo efeito de inserção de 21 moléculas de  $\text{CO}_2$ . No entanto, estima-se que até hoje a contribuição ao aquecimento pelo metano é aproximadamente um terço do aquecimento causado pelo  $\text{CO}_2$ , devido às suas baixas concentrações presentes na atmosfera frente às de dióxido de carbono.

Ainda assim, é importante estimar o fluxo de  $\text{CH}_4$  emitido para a atmosfera. Estima-se que 70% das emissões atuais de  $\text{CH}_4$  são de origem antropogênica, causadas pela criação de animais ruminantes, plantações de arroz, inundações de biomassa e aterros sanitários, entre outros. Em todo caso, o principal causador desta emissão são os processos de degradação anaeróbia de matéria orgânica.

Nota-se a importância do vapor d'água como o principal gás de efeito estufa, no entanto, por ser um gás que está presente na atmosfera em concentrações aproximadamente constantes, e sendo que sua quantidade é praticamente independente das ações humanas, este não será considerado neste texto.



## 2.2 O Papel dos Reservatórios na Emissão de GEE's

A energia provida pelas hidrelétricas tem sido considerada limpa sob vários aspectos, principalmente frente a outras formas de obtenção não-renováveis, como é o caso da queima de combustíveis fósseis. Isto significa que esta matriz energética não emite, por exemplo, material particulado, fuligem ou efluentes térmicos, entre outros problemas de caráter mais local.

No entanto, sob um olhar global, percebe-se que as hidrelétricas têm suas desvantagens ambientais — excluindo-se os inúmeros problemas causados pelo alagamento de grandes áreas para formação dos reservatórios. Esta desvantagem está focada no aspecto de emissões de GEE's, cujas observações têm sido estudadas desde a década de 1990 (Mendonça et al., 2012).

Diante disso, faremos nas próximas seções um breve histórico dos estudos de emissões de GEE's por reservatórios e os processos físicos, químicos e biológicos envolvidos, além de discutirmos o importante papel da modelagem nos aspectos de previsão das emissões, revendo alguns trabalhos realizados.

### 2.2.1 Histórico

Muito tem sido estudado sobre a emissão de GEE's por reservatórios de hidrelétricas nos últimos 25 anos, quando do lançamento do primeiro relatório de avaliação do IPCC, em 1990. Desde então os debates aumentaram, principalmente diante das discordâncias entre os autores das pesquisas em certos pontos, tais como a quantidade de gases emitidos pelos reservatórios. Existe concordância, entretanto sobre a existência das emissões, principalmente em lagos tropicais (Mendonça et al., 2012).

Alguns dos primeiros estudos foram realizados no Canadá, em 1993 e 1995, além do Brasil (Rosa e Schaeffer, 1994, Fearnside, 1995 e Fearnside, 1997), Panamá (Keller e Stallard, 1997), Guiana Francesa (Galy-Lacaux et al., 1997 e Galy-Lacaux et al., 1999), Finlândia (Huttunen et al., 2002), Estados Unidos (Soumis et al., 2004), Suécia (Aberg et al., 2004) e Suíça (Diem et al., 2007). Mais recentemente, reservatórios na China também foram analisados (Chen et al., 2009 e Zheng et al., 2011).

Este breve levantamento mostra a importância que se tem dado ao assunto e a grande

variabilidade de locais em que se dão os estudos. Gagnon e de Vate (1997) estimaram uma baixa emissão de GEE's pelas hidrelétricas quando em comparação a outras fontes de energia. No entanto, não consideraram os reservatórios tropicais, onde têm sido verificadas grandes taxas de emissão, em especial em grandes lagos amazônicos (Fearnside, 2002 e Fearnside, 2005).

É justamente na América do Sul (largamente representada pelo Brasil) que se tem um grande número de reservatórios estudados (15), cujo total representa 5% do número dos lagos no mundo, ou 13% da área total alagada (Mendonça et al., 2012).

Alguns estudos sugerem cuidado ao se comparar a geração de GEE's por reservatórios de hidrelétricas e pelo uso de termoelétricas. Rosa et al. (2004) e dos Santos et al. (2006) concluem que se deve levar em conta não apenas a emissão líquida do lago, mas também o *degassing*, a diferença entre a emissão anterior e posterior ao alagamento (Tremblay et al., 2004), para se conhecer o real impacto antropogênico, além da relação entre geração de energia e área inundada, entre outras sugestões.

### **2.2.2 O Que Influencia a Geração de GEE's em Reservatórios?**

Os reservatórios de centrais hidrelétricas recebem atenção especial frente a lagos naturais, pois apesar de os dois poderem emitir GEE's, os reservatórios são resultado da atuação humana. Alagando-se essas áreas, praticamente todas as formas de matéria orgânica vegetal morrem e assim disponibilizam, no recém formado corpo d'água, uma grande quantidade de carbono pronto a ser decomposto (além de criarem um novo ecossistema, com novas espécies animais e vegetais), de maneira que aumentam as emissões de GEE's naquela área que anteriormente emitia de forma natural, ou até mesmo com balanço quase nulo (Mendonça et al., 2012).

A questão temporal é de suma importância nestas análises, pois em geral reservatórios novos tendem a emitir quantidades muito maiores de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub>, já que existe grande disponibilidade de matéria orgânica recentemente inundada e para corpos d'água mais antigos, a emissão pode se assemelhar a lagos naturais (Tremblay et al., 2004), já que a matéria orgânica ainda não decomposta é quase toda refratária, agora. Teodoru et al. (2010) verificaram que a queda nas emissões de CO<sub>2</sub> pode assumir feição exponencial decrescente nos primeiros anos após a inundação. A matéria orgânica refratária diferencia-se da lábil pela rapidez no consumo, ou

seja, a primeira demora meses, ou até anos, para ser decomposta pelas bactérias, enquanto a segunda possui taxa de consumo maior.

Na verdade, esta condição vai depender de vários fatores, como o tipo de vegetação previamente presente no local da inundação e também da localização deste reservatório no globo, pois o clima (através da temperatura, como será melhor abordado adiante) irá influenciar fortemente as reações de consumo.

Teodoru et al. (2010) ainda postularam que nos primeiros anos a emissão de  $\text{CO}_2$  é dada primariamente pela decomposição da vegetação superficial e depois pela matéria que se acumulou ou já estava presente no sedimento.

Roland et al. (2010) verificaram uma grande variabilidade espacial nas emissões de  $\text{CO}_2$  dada pela distribuição da mata inundada, morfologia (batimetria), pontos de lançamento de esgoto e pela hidrodinâmica, fortemente ligada ao nível do reservatório.

Portanto, não é apenas o tipo da vegetação anterior que irá definir os padrões de emissão do reservatório, mas também sua distribuição, toda a carga de matéria orgânica afluyente ao lago, através dos rios e da drenagem da bacia. Essa influência não se dá apenas pelo carbono propriamente dito, que chega ao reservatório, mas também pelo aporte de insumos agrícolas e esgotos com grandes quantidades de nutrientes que irão afetar a produção primária, que em seguida serão fontes de carbono.

Além do descrito acima, os reservatórios são grandes retentores de sedimento, pois neste ponto o rio é bloqueado, o que praticamente torna nula sua velocidade, favorecendo a sedimentação dessas partículas que antes estavam suspensas na coluna d'água. Esta condição é importante, pois a formação e contínuo crescimento deste compartimento no lago aumenta significativamente a emissão de GEE's, já que em geral podem estar fortemente carregados de matéria orgânica e facilmente formam uma condição anóxica em seus níveis inferiores, favorecendo a formação de  $\text{CH}_4$ .

O acúmulo de sedimento nos reservatórios não está apenas associado à geração direta de GEE's, mas também altera uma condição natural em que há menos emissão geral quando estas partículas terminam seu processo de deslocamento até os oceanos, pois de acordo com Mendonça et al. (2012), a matéria orgânica do sedimento dos reservatórios tem mais chance de se mineralizar do que no oceano. Além disso, Vörösmarty et al. (2003) estimaram que os rios

represados retêm até 50% de todo sedimento drenado pelas bacias hidrográficas.

A produção de GEE's no sedimento (assim como no hipolímnio) está associada, principalmente, à condição anóxica ou quase anóxica deste compartimento, em que ocorrerá a produção em maior quantidade de metano. Este gás em sua maioria se tornará CO<sub>2</sub> quando em contato com níveis superiores, na presença do oxigênio, devido ao seu consumo pelas bactérias metanotróficas, que ali estão presentes. Maiores detalhes desta produção e consumo serão vistos no capítulo 3.

Outro importante fator que influencia a formação dos gases estufa na água é a temperatura. Pode-se dizer que esta agirá de forma direta e indireta, mas em ambos os casos tendo grande importância. Diretamente, pois todas as reações químicas e processos de consumo, produção e decaimento que estão associados ao metabolismo das espécies vivas, dependem da temperatura — Thomann e Mueller (1987) e Chapra (1997). Indiretamente, pois a temperatura (ou o seu gradiente ao longo da profundidade) atuará na física do reservatório, já que esta modifica a densidade da água, que por sua vez criará um perfil estratificado ou não, podendo criar regiões de menor mistura, no fundo do reservatório, com menores concentrações de oxigênio dissolvido, que ressaltará a situação descrita no parágrafo anterior. Estes processos também serão melhor vistos no capítulo 3.

Le Yana et al. (2014) resumem como fatores importantes a se considerar na análise de emissões de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> pelos reservatórios (os seja, o que se deve levar em conta na modelagem): a temperatura, idade do reservatório, latitude, velocidade do vento, pH, precipitação, concentrações de clorofila e carbono orgânico dissolvido, profundidade do corpo d'água e as variações no nível. Eles ainda enfatizam a influência das turbinas e vertedouros na emissão de CH<sub>4</sub> devido ao fenômeno de *degassing*, que é a ebulição do gás dissolvido devido a uma queda abrupta de pressão e aumento da temperatura, quando da passagem da água presente em níveis mais baixos do reservatório pelas turbidas e vertedouros. Esta verificação é importante, pois as maiores concentrações de metano (na faixa de 7,5 mg/l) estão nas maiores profundidades da coluna d'água. Quando a pressão diminui muito rapidamente ocorre o lançamento do gás para a atmosfera, pois à pressão de 1 atm (à 25 °C) sua solubilidade é de 0,035 mg/l. Algumas estimativas listadas por Le Yana et al. (2014) mostram que até 64,9% e 34,5% de toda a emissão do reservatório de Tucuruí são dadas pelas turbidas e vertedouros,

respectivamente. No caso de Curuá-Una esta soma chega a 95%.

Alguns comentários ainda podem ser feitos com relação ao consumo de metano. Carini et al. (2005) fizeram medições de consumo de metano ao longo da coluna d'água e observaram que os maiores valores deste consumo não se deram nas regiões com maiores concentrações de oxigênio dissolvido (acima da oxiclina) como era de se esperar, mas sim próximo ao ponto de inflexão da concentração de oxigênio. Isto pode ter se dado, de acordo com os autores, pela migração das bactérias metanotróficas para as regiões mais propícias ao consumo, ou seja, onde o oxigênio começa a ser mais presente, mas ainda existem grandes concentrações de metano. Este comportamento foi observado em três épocas diferentes no mesmo lago e o consumo é diretamente proporcional à inclinação da oxiclina. Bastviken et al. (2002) observaram a mesma situação em um trabalho com o objetivo de comparar diferentes métodos de medição de oxidação de metano.

## 2.3 Modelagem de Emissão de GEE's

O papel da modelagem matemática é de fundamental importância nas investigações de emissões de GEE's.

Para o estudo das emissões de GEE's, o que geralmente se está interessado em saber é a quantidade de gases que o reservatório irá emitir (ou capturar) ao longo de toda sua vida útil para então comparar este impacto com a geração de energia, adotando-se assim um indicador de impacto baseado na quantidade de CO<sub>2</sub> equivalente emitido por MWh gerado, por exemplo.

Parte da discussão envolve saber: quais parâmetros são importantes e que mais influenciam as previsões; quais são as principais variáveis a serem medidas; quais os compostos (equações, variáveis prognósticas) são relevantes e qual a melhor estrutura de simulação (variabilidade espacial) a ser considerada, já que isto tem impacto direto na capacidade de obtenção de respostas e interpretação dos resultados.

Os modelos matemáticos para este fim, muitas vezes apresentam suas equações para médias espaciais, na forma de modelos concentrados, ou seja, apenas com variações temporais das concentrações dos compostos que influenciam a produção de GEE's. Esta já é, de certa forma, uma boa abordagem, pois como dito acima, geralmente o que se quer conhecer é o quanto o

reservatório como um todo irá emitir ao longo do tempo.

No entanto, sabe-se que as reações de certos compostos são fortemente influenciadas pela concentração de oxigênio — no caso do metano, por exemplo, em que esta concentração deve ser nula para sua formação e alta para sua decomposição. Além disso, como será melhor visto no capítulo 3, todas as reações têm uma grande dependência com a temperatura e, tanto o oxigênio quanto a temperatura podem variar significativamente ao longo da profundidade do corpo d'água em certas épocas do ano ou períodos do dia (Henderson-Sellers, 1984).

Diante disso, este trabalho focará seus esforços em propor um modelo discretizado espacialmente na vertical (para se observar melhor as variações de oxigênio dissolvido e temperatura na coluna d'água e assim entender seus efeitos), além de ser um primeiro passo para uma possível variação nas outras dimensões espaciais para suas variáveis. A seguir são revisados outros trabalhos que tiveram como objetivo modelar a emissão de GEE's por reservatórios e quais seus principais resultados.

O trabalho de Zahn et al. (2013) apresentou um modelo concentrado, apenas utilizando-se as relações de consumo do carbono orgânico dissolvido, que se torna carbono inorgânico dissolvido. Ambos possuem termos provenientes do carbono orgânico particulado dito vivo e morto (oriundos do fitoplâncton). Na parcela de sedimento (que não possui distinção dada pela ausência de oxigênio) estão divididos os carbonos refratário e lábil, para uma melhor representação do seu consumo a taxas diferentes.

O metano formado no sedimento é diretamente lançado para a atmosfera na forma de bolhas, enquanto que o dióxido de carbono deverá primeiramente ser absorvido pela coluna d'água para finalmente ser lançado à atmosfera por difusão através da superfície.

Mesmo sendo apenas preliminar e com certa simplicidade, o modelo foi capaz de responder às variações de temperatura ao longo do ano e de demonstrar o aumento das emissões de metano nos primeiros dias do reservatório e sua rápida queda. No entanto, o trabalho carece de relações com o oxigênio, que é um fator importante na oxidação da matéria orgânica. Ainda assim, não foram omitidas as relações do sistema carbonato, que divide o carbono inorgânico em parcelas de  $\text{CO}_2$ ,  $\text{HCO}_3^-$  e  $\text{CO}_3^{2-}$ .

Männich et al. (2015) aplicaram o modelo de Zahn et al. (2013) ao reservatório do Capivari, na região de Curitiba, Paraná, mas incluindo termos de produção por fitoplâncton, como função

da radiação solar. Ambos os trabalhos acoplaram, para sua entrada de dados, um balanço de energia térmica para definição da temperatura, em que é dado um valor médio ao longo da coluna d'água. Os resultados apresentados demonstraram boa concordância com os valores de fluxos de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> medidos. Destaca-se que o modelo recebeu calibração manual dos parâmetros de decaimento e intensidade ótima da luz.

Sharifi et al. (2013) desenvolveram um modelo para a dinâmica do carbono em pântanos sujeitos a inundações (*wetlands*), que considerou as interações biogeoquímicas que afetam o ciclo de carbono, não apenas com o objetivo de quantificar a emissão de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub>, mas também de se verificar a retenção de carbono por este ecossistema. O modelo é dividido em três compartimentos: a água e as zonas aeróbia e anaeróbia do sedimento. Neste primeiro considera-se que a mistura é completa espacialmente, ou seja, o modelo é dito concentrado. É ali que ocorre a comunicação com a atmosfera para fins de trocas de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub>. Em cada compartimento são considerados os compostos carbono orgânico particulado lábil e refratário (originários da vegetação e algas) que através da hidrólise podem se tornar carbono orgânico dissolvido. Este, por sua vez, transforma-se em CO<sub>2</sub>. Estes três compostos podem se comunicar com as camadas de sedimento e gerar metano quando da ausência de oxigênio. A área estudada para validação do modelo foi uma região alagada restaurada no estado de Maryland (EUA), próximo à baía de Chesapeake. Os resultados para exportação (saída) de carbono orgânico total foi satisfatório em prever sua dinâmica, mas ruim quando da presença de grandes vazões de saída. Os autores ainda mencionaram a importância de uma boa escolha (calibração) do grande número de parâmetros utilizados no modelo, os quais possuem significado físico-químico, e podem ter influenciado em alguns resultados.

O modelo proposto por Hanson et al. (2004) foi desenvolvido para representar os lagos temperados dos Estados Unidos. O trabalho considera o carregamento de matéria orgânica pela lixiviação dos materiais na bacia. O modelo considera, de forma simplificada, a transferência de compostos orgânicos e inorgânicos dissolvidos e orgânico particulado. As relações de morte e crescimento de algas são dadas por formulações, ou seja, não são incógnitas do problema. O modelo consiste em um sistema de equações diferenciais ordinárias que evoluem no tempo, sendo que lago é considerado bem misturado em todas as dimensões espaciais. Existe também uma pequena diferenciação nas equações de modo a se poder estimar as variações em períodos de

estratificação do lago. Apesar da simplicidade, já que o modelo não trabalha com equações mais complexas para o sedimento nem calcula emissões de  $\text{CH}_4$ , os resultados indicam a importância em se considerar o lago como um fator relevante no processamento da matéria orgânica proveniente da bacia hidrográfica e a forma como isto influencia na emissão de gases para a atmosfera. Os autores verificaram até 60% de retorno para a atmosfera desta matéria antes fixada pela vegetação terrestre.

Weissenberger et al. (2010) criaram um modelo relativamente simplificado para verificar a dinâmica do carbono no complexo hidrelétrico de La Grande, no estado do Quebec, Canadá. A abordagem envolve todos os sete reservatórios do sistema e possui como entrada de dados, não apenas as concentrações no rio principal (ou dos reservatórios a montante) mas também da bacia de drenagem, considerando carbono orgânico dissolvido, suspenso e suspenso particulado, que pode vir da erosão ou lixiviação das áreas inundadas ou da bacia de drenagem. O modelo não considera a emissão de  $\text{CH}_4$ . Foram consideradas três abordagens para a estimativa de emissão difusiva do  $\text{CO}_2$ . Nas duas primeiras foi considerada uma regressão logarítmica nos dados medidos ao longo dos anos e ajustada uma taxa de queda das emissões ao longo do tempo. Na terceira abordagem foi considerada uma relação empírica entre a concentração do carbono orgânico dissolvido e os fluxos difusivos de  $\text{CO}_2$  medidos (em associação aos dados de velocidade do vento e temperatura do ar) nos reservatórios e lagos da região do último reservatório da cascata. Os resultados para simulações de 50 a 100 anos mostraram concordância com a queda das emissões de  $\text{CO}_2$  ao longo dos anos, já que a matéria lixiviada inicialmente presente decai com o tempo. A estabilização levou até 10 anos para ocorrer. Além disso, os autores também atestam que o crescimento das emissões foi causado pelo aumento do tempo de residência causado pelo barramento do rio. Por fim os autores sugerem a inserção das emissões dos reservatórios nas estimativas globais de gases de efeito estufa e nas diretrizes do protocolo de Quioto.

É interessante discutir também alguns modelos de qualidade de água, pois estes, em geral, demonstram bem as relações entre todos os compostos de interesse nestes estudos, já que a matéria orgânica na água (que pode resultar em emissão de GEE's) depende fortemente de outros fatores, como fito e zooplâncton, que por sua vez são forçados pelos nutrientes, entre outros fatores.



Um modelo para rios bastante usado é o QUAL2K ou Q2K — *Stream Water Quality Model*, (EPA, 2013) — que trabalha com uma discretização unidimensional no sentido longitudinal e modela, entre outros compostos, as concentrações de demanda bioquímica de oxigênio (DBO), dividida em duas partes (lenta e rapidamente oxidável), detritos (matéria orgânica não-dissolvida), nutrientes, oxigênio dissolvido, pH e uma comunicação da água com o sedimento que é segmentado em duas partes (aeróbia e anaeróbia) (Chapra et al., 2008). Todos os compostos orgânicos, através de uma parcela de seu balanço, chegam ao fundo do corpo d'água pelo processo de sedimentação. No sedimento anaeróbio ocorre a metanogênese, entre outros processos. No entanto, este modelo não possui balanço desta substância na coluna d'água (apenas uma oxidação ainda no sedimento aeróbio), ficando esta parte da análise ligeiramente deficiente. Os demais compostos formados no sedimento e na água, entre eles o  $\text{CO}_2$ , se comunicam com a atmosfera, podendo ser emitidos ou absorvidos. Na verdade, este modelo foi desenvolvido para rios, que possuem em geral uma boa mistura de oxigênio, não ficando estratificados, como os reservatórios, e assim a ausência de metano na coluna d'água fica bem justificada.

Um outro importante modelo é o CE-QUAL-W2, que trabalha com equações em duas dimensões (longitudinal e vertical), conseguindo portanto, trabalhar com corpos d'água estratificados, como lagos e estuários. O modelo, além da hidrodinâmica nestes dois eixos, é capaz de representar os compostos de qualidade da água tais como DBO, algas, zooplâncton, macrófitas, nutrientes, interações OD-DBO, além de efeitos de estruturas hidráulicas, entre outras (EPA, 2015). Até a sua versão 3.72, de 2015, este não era capaz de lidar com o lançamento de gases de efeito estufa, como o metano, por exemplo, apenas dióxido de carbono. A nova versão 4.0, de abril de 2016, do modelo já conta com tais processos.

Baseados em parte no modelo supracitado (Q2K), Brasil (2014) e Hoeltgebaum e Gobbi (2015) propuseram um modelo concentrado simplificado para estimar as emissões de GEE's, modelando o carbono orgânico dissolvido (DBO) de rápida e lenta decomposição, carbono orgânico particulado (chamado detritos), OD, fitoplâncton, nitrogênio (orgânico, amoniacal e nitrato), fósforo orgânico e inorgânico, dióxido de carbono e metano. O modelo foi dividido em três compartimentos (água, sedimento aeróbio e anaeróbio). Os resultados simulados para o reservatório de Funil, Rio de Janeiro, mostraram boa concordância com a realidade físico-

química esperada, mas não conseguiram prever os fluxos medidos, possivelmente, em parte segundo os autores, devido à ausência de calibração dos parâmetros. Brasil (2014) cita ainda que a metodologia muito simplificada do modelo ebulitivo de metano pôde ter contribuído para uma subestimativa destes fluxos, além do fato de que o tipo de medição em campo (com o uso de câmaras) é pontual no tempo e no espaço, e o modelo apresenta uma média espacial como resultado, tornando a comparação um pouco difícil.

## Capítulo 3

# Metodologia e Fundamentação Teórica

Diante do que foi levantado no capítulo 2, o objetivo deste trabalho é a construção e teste de um modelo capaz de quantificar a emissão de GEE's a partir de reservatórios de hidrelétricas. Para isto, será tomada aqui uma abordagem ligeiramente diferente do que tem sido feito em outros trabalhos. A ideia é:

- trabalhar com um modelo não-permanente discretizado espacialmente na vertical para a coluna d'água e em dois compartimentos para o sedimento (aeróbio e anaeróbio);
- dar mais atenção às reações que ocorrem no sedimento, pois este é um compartimento menos explorado pelos modelos de qualidade de água e é principalmente ali (e no hipolímnio anóxico) que se concentra a produção do metano;
- em um primeiro momento, focar os estudos no ciclo do carbono, ou seja, nas entradas que são dadas pela matéria orgânica e suas saídas ( $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$ ).

Esse enfoque se mostra necessário para melhor entendimento das relações entre os compostos que formam o ciclo do carbono, pois se houver demasiadas espécies que podem influenciar os resultados, as calibrações e análises se tornam mais difíceis de serem realizadas. Depois de bem entendidas as trocas e reações do ciclo do carbono, pode-se eventualmente inserir outras variáveis, uma a uma, a fim de se ter um modelo mais completo. Portanto, num primeiro momento, estamos considerando que as demais variáveis de qualidade da água (nutrientes, fito e zooplâncton, entre outros) estão aproximadamente em equilíbrio com a dinâmica do carbono.

Além disso, espera-se que olhando mais detalhadamente para o sedimento, pode-se entender melhor os processos que regem a geração do metano que, como já foi dito, é muito importante como GEE, além de influenciar diretamente as concentrações de  $\text{CO}_2$ .

Este trabalho se concentrará em resolver, para cada composto, uma equação do tipo diferencial parcial, com variações temporal e espacial na vertical. Os compostos analisados para fim de modelagem (incógnitas do problema) serão:

- oxigênio dissolvido (OD);
- carbono orgânico (Corg):
  - Corg dissolvido;
  - Corg particulado lábil e refratário;
- carbono inorgânico ou dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ );
- metano ( $\text{CH}_4$ ).

Sabe-se que outros compostos influenciam as concentrações de OD, Corg,  $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$ , como o fitoplâncton e os nutrientes. No entanto, num primeiro momento, as equações que darão estas quantidades serão simplificadas e dadas por formulações que não as tornem incógnitas do problema. A estratégia, neste caso, é inicialmente simplificar o modelo e dar atenção especial ao ciclo do carbono. Quando esta parte estiver bem entendida, o acoplamento dos demais compostos se tornará trivial e menos suscetível a erros.

O domínio será dividido em duas partes distintas: água e sedimento. Cada uma destas partes é tratada no texto em seções distintas a seguir, pois serão abordadas de formas diferentes, já que os balanços na água serão equações contínuas no espaço e no tempo e para o sedimento haverá equações específicas para cada um de seus dois compartimentos.

Antes de descrever os processos biogeoquímicos que ocorrem na água, temos que ter em mente que a discretização vertical deste modelo só é possível através do conhecimento dos perfis de temperatura e do coeficiente de difusão turbulenta ao longo da profundidade do reservatório, conforme melhor discutido na seção 3.1. As considerações a respeito das reações do ciclo de carbono na coluna d'água e no sedimento são feitas, respectivamente, nas seções 3.2 e 3.3.

### 3.1 Coeficiente de Difusão Turbulenta e Perfil de Temperatura

O coeficiente de difusão vertical engloba dois tipos de difusividade, a molecular, dada pela lei de Fick, em que as moléculas de um soluto tendem a preencher uma parte do fluido com menor concentração, reduzindo seu gradiente e a turbulenta, que é causada principalmente pelos vórtices e flutuações da velocidade do fluido.

Estas flutuações, no caso de corpos d'água como reservatórios e rios, podem ser causadas por vários fatores, entre eles, o escoamento devido à declividade (geralmente mais importante na direção longitudinal), tensão de cisalhamento causada pelo vento e gradiente de densidade (causado, principalmente, pelas diferenças de temperatura, mas também de salinidade, eventualmente).

Devido a estas outras forçantes, o coeficiente de difusão turbulenta acaba por se tornar várias ordens de grandeza maior que o de difusão molecular tornando este segundo, desprezível diante do primeiro. Por isso, neste trabalho o coeficiente de difusão já incluirá a parte turbulenta e molecular. Além disso, o coeficiente de difusão turbulenta para o calor será usado para todos os compostos, já que estamos considerando que diferenças de concentrações não causam mistura.

Por causa do aquecimento provocado pela radiação solar na superfície da água, existe uma difusão de calor para as camadas do fluido mais abaixo. Esta difusão tem uma forte dependência com a profundidade, sendo que a distribuição de temperatura do corpo é função da distância que se está da fonte de calor (a superfície, neste caso).

A equação para a temperatura em função da profundidade é apresentada abaixo:

$$A(z)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ A(z)K_H(z)\frac{\partial T}{\partial z} \right] - \frac{1}{\rho_W c_p} \frac{\partial(A(z)H_s(z))}{\partial z} \quad (3.1)$$

em que  $T$  é a temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ ),  $\rho_W$  e  $c_p$  são a densidade ( $\text{kg m}^{-3}$ ) e o calor específico da água ( $\text{J Kg}^{-1} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$ ), respectivamente.  $K_H(z)$  é o coeficiente de difusão turbulenta para a temperatura ( $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ ),  $A(z)$  a área do reservatório ( $\text{m}^2$ ) e  $H_s(z)$  é o fluxo de energia no corpo d'água ( $\text{W m}^{-2}$ ), todos função da posição vertical  $z$  na coluna d'água. O primeiro termo do lado direito da

equação representa a difusão de calor ao longo da coluna vertical do corpo d'água e o segundo a fonte dada pela radiação solar que penetra no lago.

Vale notar que o coeficiente de difusão turbulenta é função da coordenada vertical e da própria temperatura a ser resolvida (apêndice A.2), ou seja, a equação é não-linear. Existem vários trabalhos que resolvem esta equação numericamente e assim geram os perfis de temperatura e do coeficiente de difusão turbulenta, para cada ponto na vertical do corpo d'água, para cada instante no tempo.

O coeficiente de difusão turbulenta causa o processo de mistura de todos os escalares, amortecida pela diferença de densidade (causada pela diferença de temperatura) e pelo atrito do vento na superfície da água na direção vertical. Neste trabalho, consideraremos o coeficiente de difusão turbulenta  $K_H$  como sendo o mesmo para todos os compostos.

A solução para a temperatura da água acaba por tornar-se uma parte importante neste trabalho, pois é fundamental que sejam gerados os perfis de temperatura e do coeficiente de difusão turbulenta para a modelagem unidimensional na vertical, já que estes resultados servirão como dados de entrada para a solução das equações dos compostos no reservatório.

O trabalho de da Silva (2014) foi utilizado como base para a geração dos perfis de temperatura e coeficiente de difusão turbulenta, assim como seu equacionamento e discretização. Alguns conceitos importantes que regem esta parte do trabalho são descritos brevemente abaixo enquanto que o equacionamento completo pode ser visto no apêndice A.

O primeiro conceito fundamental é a definição das condições de contorno na superfície e no fundo. Ambos são dados por um fluxo de energia, sendo que no fundo este valor é nulo e na superfície é dado pelas transferências de calor entre a água e a atmosfera, usando-se o conceito de temperatura de equilíbrio em que a temperatura da água tende a estar em equilíbrio com uma temperatura fictícia, função do balanço de energia na superfície.

Outra questão importante é a forma como se trata o coeficiente de difusão turbulenta, dado que existem diversas formulações possíveis. da Silva (2014) utiliza o trabalho proposto por Sundaram e Rehm (1971) em que é necessário que se ajuste alguns parâmetros de calibração.

## 3.2 Balanços na Água

O balanço de uma substância (soluto)  $\chi$  na água pode ser descrito de forma muito semelhante à equação (3.1):

$$\frac{\partial C_\chi}{\partial t} = \frac{1}{A(z)} \frac{\partial}{\partial z} \left[ K_H(z) A(z) \frac{\partial C_\chi}{\partial z} \right] + S_\chi \quad (3.2)$$

$$S_\chi = \frac{Q_{in} C_{\chi in}}{V} - \frac{Q_{out} C_\chi}{V} \pm R_\chi \quad (3.3)$$

em que  $Q_{in}$  e  $Q_{out}$  são, respectivamente, as vazões de entrada e saída do reservatório ( $\text{m}^3 \text{s}^{-1}$ ) juntamente com as concentrações da espécie  $\chi$  que as acompanha ( $C_{\chi in}$  e  $C_\chi$ ,  $\text{kgm}^{-3}$ ). O termo  $R_\chi$  contempla as fontes e sumidouros que devem ser considerados para cada espécie e, portanto, é fundamental que se entenda como ocorrem suas interações com as demais.

Sabe-se que a matéria orgânica pode entrar no reservatório através dos rios afluentes, que trarão a maior parte do carbono lixiviado pela bacia hidrográfica. Além disso, os rios aportarão outras substâncias importantes, como compostos de nitrogênio e fósforo que alteram a forma como as algas podem crescer. Aqui não serão considerados aportes difusos da bacia ao reservatório.

O reservatório em si também possui suas fontes internas de matéria orgânica, que são dadas pela morte das algas e outras formas de vida, como peixes, bactérias, plâncton, macrófitas e outros. A vegetação que foi afogada durante o enchimento do reservatório também gerará matéria orgânica através de suas folhas e galhos pelo processo de lixiviação. Além disso, no caso de reservatórios com grande variação de nível ao longo do ano, pode-se ter um crescimento sazonal de vegetação nas margens, que posteriormente será afogada.

A forma como a matéria orgânica transita entre os compartimentos<sup>1</sup> do reservatório é a essência deste trabalho, ou seja, entender o que de fato influencia estes processos, quais forçantes e coeficientes realmente importam na modelagem, traduzindo matematicamente a realidade destes processos. Estas transições envolvem, por exemplo, a passagem do carbono orgânico

---

<sup>1</sup>Compartimento, aqui, significa cada espécie modelada, ou seja, carbono orgânico dissolvido, particulado, oxigênio dissolvido,  $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$ .

particulado para dissolvido e depois para carbono inorgânico ( $\text{CO}_2$ ), consumindo oxigênio dissolvido, ou ainda a “captura” do carbono inorgânico para a biomassa das algas, gerando OD na presença de radiação solar. Todos estes processos serão avaliados para o equacionamento do modelo.

### 3.2.1 Análise de Sensibilidade aos Coeficientes do Modelo

A seguir são analisados alguns coeficientes importantes na modelagem do ciclo de carbono. Neste modelo proposto, alguns desses coeficientes são utilizados ou são equivalentes, por isso é possível se utilizar da análise de sensibilidade feita utilizando-se o trabalho apresentado por Hoeltgebaum e Gobbi (2015) e Brasil (2014), em que foi desenvolvido um modelo concentrado para emissão de GEE's. Ali foram apresentadas um grande número de equações para as substâncias modeladas e conseqüentemente um número de coeficientes/taxas de reação tão grande quanto. Sabendo-se, pela literatura, que alguns destes coeficientes possuem uma larga faixa de variação de seus valores, além de dependerem fortemente do reservatório modelado, foi feita uma análise preliminar da sensibilidade apresentada pelo modelo nos resultados das variáveis mais relevantes, como oxigênio dissolvido, dióxido de carbono e metano.

Para a análise, foram escolhidos os coeficientes/taxas de reação que possuem maior faixa de variação de acordo com a literatura. Os coeficientes avaliados estão listados e descritos na tabela 3.1. O processo de verificação foi feito da seguinte forma:

1. para cada coeficiente foram sorteados aleatoriamente, de uma distribuição uniforme, 20 valores limitados pelos valores mínimo e máximo, encontrados na literatura;
2. foi feita uma simulação para cada um destes 20 valores (enquanto se varia os valores de um dos coeficientes, os demais são mantidos constantes no valor médio encontrado para cada um);
3. analisou-se a influência destas variações nas concentrações de oxigênio dissolvido,  $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$ , na coluna d'água.

Os 20 resultados finais das 3 espécies para a variação de cada coeficiente podem ser vistos na figura 3.1, em que cada uma das ordenadas representa um dos coeficientes. Para relacionar



Tabela 3.1: Coeficientes para reações na água, contidos no modelo proposto por Hoeltgebaum e Gobbi (2015) e Brasil (2014).

Coeficiente	Significado Físico
$D_{P1,20}$	Taxa de redução do fitoplâncton por respiração e excreção a 20 °C
$D_{P2}$	Taxa de redução do fitoplâncton por morte
$G_{20}$	Taxa de crescimento/fotossíntese dependente da temperatura
$f$	Fotoperíodo
$K_{d,20}$	Taxa de oxidação da DBO a 20 °C
$K_e$	Coeficiente de extinção da luz
$K_{sN}$	Constante de meia saturação de nitrogênio
$K_{uN}$	Constante de meia saturação para o consumo de nitrogênio
$K_{sP}$	Constante de meia saturação de fósforo
$K_{uP}$	Constante de meia saturação para o consumo de fósforo
$K_M$	Taxa de oxidação do metano na água
$K_{P1,20}$	Taxa de mineralização do fósforo orgânico a 20 °C

o coeficiente à ordenada, basta verificar a sua ordem na legenda. Nota-se que existem alguns parâmetros que influenciam diretamente nas concentrações dos três produtos finais analisados: a taxa de oxidação da DBO ( $K_{d,20}$ ), o coeficiente de extinção da luz ( $K_e$ ) e as taxas de redução ( $D_{P1,20}$ ) e de crescimento do fitoplâncton ( $G_{20}$ ). Isso mostra como o modelo pode ser sensível à concentração de algas, pois são elas que formam e consomem matéria orgânica através da fotossíntese e respiração, enquanto que a função do primeiro parâmetro citado é a de justamente gerar  $\text{CO}_2$  consumindo OD. Outro parâmetro importante é a taxa de consumo do metano na presença de OD ( $K_M$ ) que influencia na geração de  $\text{CO}_2$ .

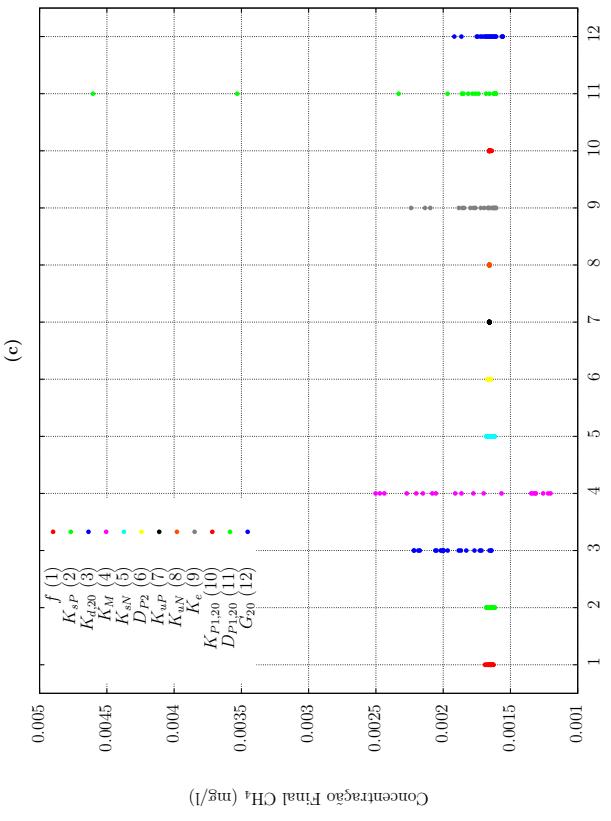
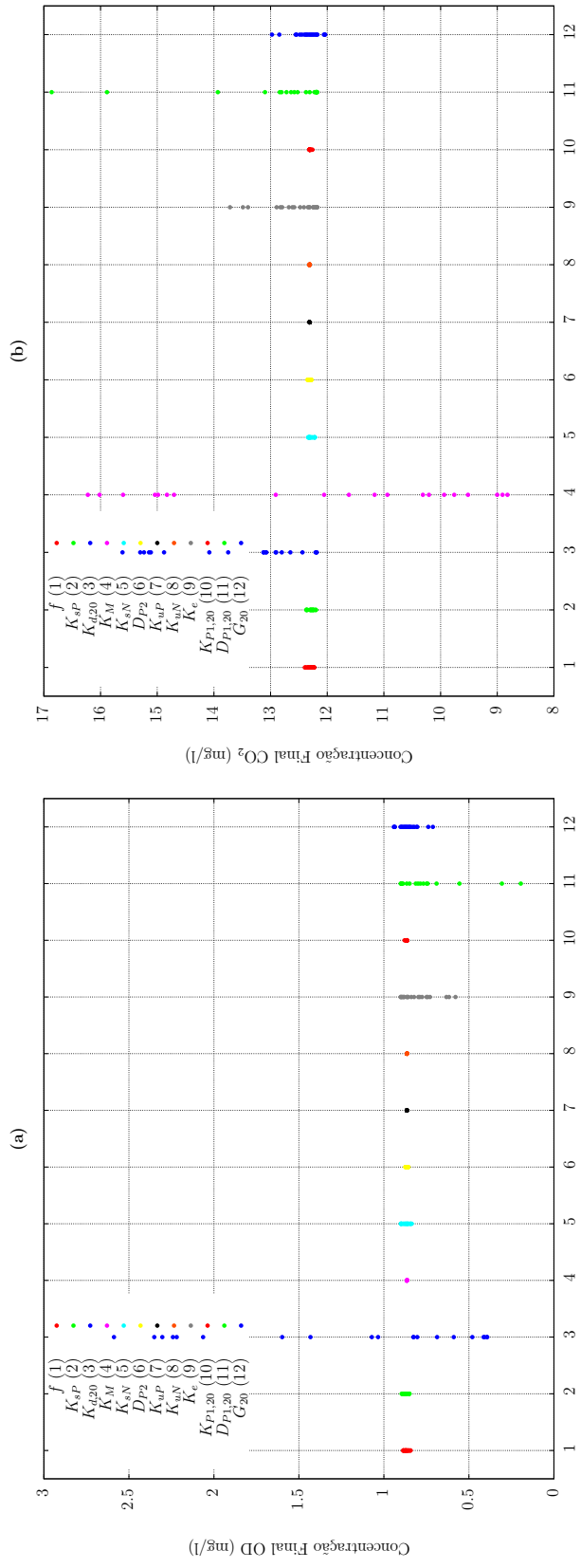


Figura 3.1: Resultados finais nas concentrações de oxigênio dissolvido (a), dióxido de carbono (b) e metano dissolvido (c), de acordo com as 20 variações de cada coeficiente.

A partir de agora serão descritas cada uma das espécies modeladas neste trabalho, ou seja, o soluto  $\chi$  indexado na equação (3.2). É importante salientar neste momento que esta equação é, como já foi dito, do tipo diferencial parcial no tempo e no espaço, com uma derivada de primeira ordem em  $t$  e de segunda ordem em  $z$ . Isto significa que será necessário estabelecer uma condição inicial em  $t$  (um valor de cada concentração no início da simulação) e duas condições de contorno em  $z$ , tomadas na superfície e no fundo do reservatório (interface água-ar e água-sedimento, respectivamente). Estas condições de contorno serão apresentadas juntamente com a descrição de cada composto, abaixo. A figura 3.2 representa os processos de troca e transformação que ocorrem na coluna d'água, entre os compostos modelados.

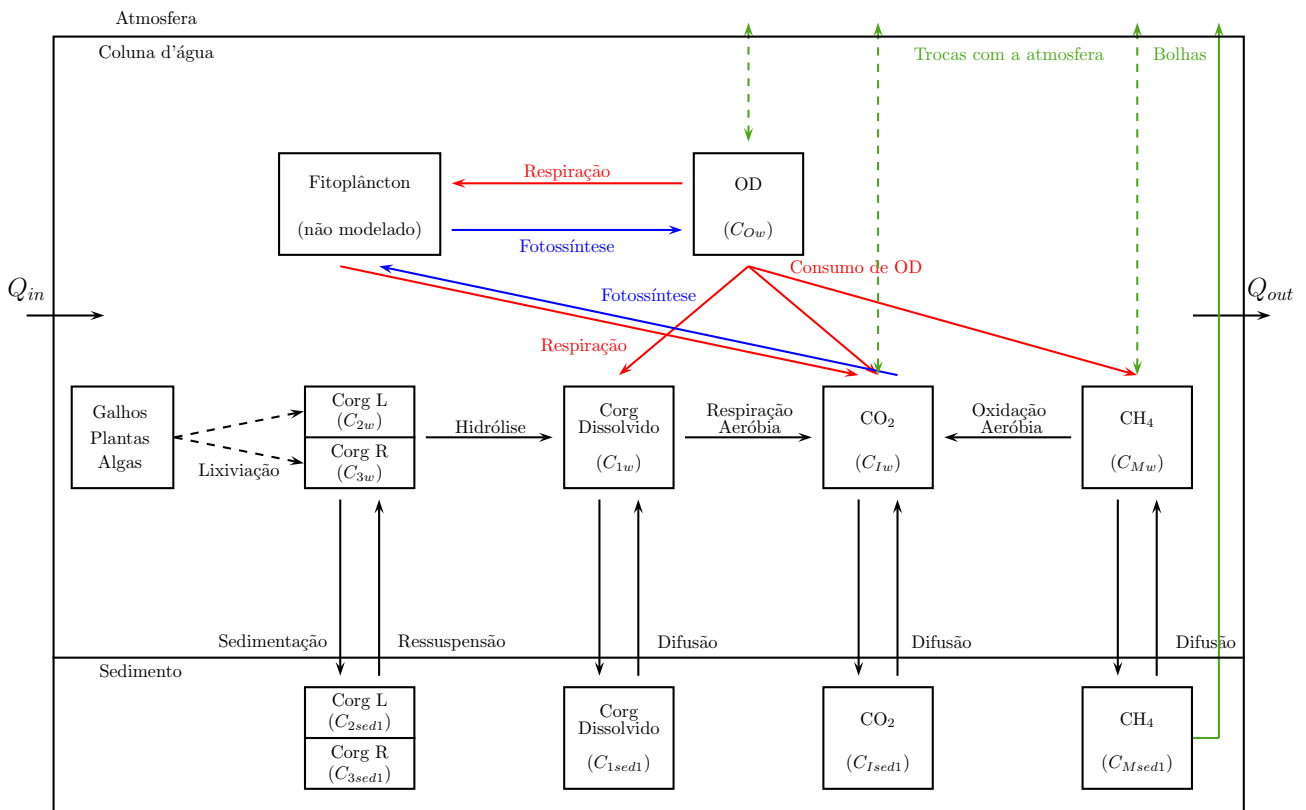


Figura 3.2: Esquema dos processos que ocorrem na coluna d'água. As linhas azuis indicam como o oxigênio pode ser formado pela fotossíntese; linhas vermelhas indicam consumo de OD por respiração; verdes pontilhadas fluxos de ou para atmosfera; e verde sólida a emissão de bolhas de metano do sedimento.

### 3.2.2 Oxigênio Dissolvido

Quando se fala em qualidade da água, entende-se o oxigênio dissolvido (OD) como um dos principais componentes a ser modelado, pois este é essencial para a maioria das formas de vida existentes na água.

Para fins de quantificação de emissão de GEE's, a presença desta molécula, juntamente com bactérias que consomem matéria orgânica, irá determinar a formação de CO<sub>2</sub>, por exemplo, assim como sua ausência causará a formação de CH<sub>4</sub>. Por isso, modelar o OD irá permitir que se conheça possíveis regiões anóxicas na coluna d'água, onde ocorrerá a formação deste último gás.

A fonte do oxigênio dissolvido é dada pela reaeração (trocas com a atmosfera) e fotossíntese/crescimento do fitoplâncton enquanto seu consumo é dado pela nitrificação, oxidação da matéria orgânica (na coluna d'água e no sedimento) e respiração/morte das algas. Assim, o termo  $R_x$  da equação (3.2), para o oxigênio dissolvido, fica:

$$R_{O_w} = r_{oc}r_{ca}(G_P - D_P)C_{P_w} - r_{oc}k_{d_1}C_{C_{1w}} - r_{on}C_{N_w} - r_{oc}k_M C_{M_w} \quad (3.4)$$

em que  $r_{oc}$  (mgO<sub>2</sub>/mgC),  $r_{ca}$  (mgC/mgcl-*a*) e  $r_{on}$  (mgO<sub>2</sub>/mgN) são as razões estequiométricas entre oxigênio-carbono, carbono-clorofila-*a* e oxigênio-nitrogênio,  $k_{d_1}$  e  $k_M$  são as taxas (s<sup>-1</sup>) de consumo do carbono orgânico ( $C_{C_{1w}}$ ) e metano ( $C_{M_w}$ ) dissolvidos na água (mg m<sup>-3</sup>).  $C_{O_w}$  é a concentração de OD,  $C_{P_w}$  de fitoplâncton (clorofila-*a*) e  $C_{N_w}$  a de nitrogênio orgânico na água (mg m<sup>-3</sup>)<sup>2</sup>.  $G_P$  e  $D_P$  são, respectivamente, as taxas de produção (fotossíntese) e consumo (respiração/morte) de oxigênio pelo fitoplâncton (s<sup>-1</sup>). A taxa de produção é função da temperatura, da disponibilidade de radiação e dos nutrientes (amônia, nitrato e fósforo inorgânico), conforme:

$$G_P = G(T)G(I)G(N) \quad (3.5)$$

em que  $G(T)$ ,  $G(I)$  e  $G(N)$  são respectivamente os efeitos da temperatura, radiação e nutrientes no crescimento do fitoplâncton, conforme as descrições abaixo.

---

<sup>2</sup>ao longo de todo o texto, os subscritos *w*, *sed1* e *sed2* indicam, respectivamente, concentrações da respectiva espécie na coluna d'água, no sedimento aeróbio e anaeróbio.

### 1. Efeito da Temperatura

O efeito de temperatura é obtido através da taxa de crescimento a 20 °C ( $G_{20}$ ) corrigida pela temperatura da água através do fator de correção  $\theta_G$ :

$$G(T) = G_{20}\theta_G^{(T-20)} \quad (3.6)$$

### 2. Efeito da Radiação Solar

Segundo Chapra (1997), a radiação influencia o crescimento do fitoplâncton da seguinte forma:

$$G(I) = \frac{2,718f}{K_e H} \left[ \exp\left(-\frac{I_a}{I_s} e^{(-K_e H_2)}\right) - \exp\left(-\frac{I_a}{I_s} e^{(-K_e H_1)}\right) \right] \quad (3.7)$$

em que  $f$  é o foto-período ( $\text{dia}^{-1}$ ),  $H_1$  é a posição de referência (aqui tomada como a superfície, portanto igual a zero),  $H_2$  é a posição de interesse e  $H$  é diferença entre os pontos  $H_2$  e  $H_1$  (m),  $I_a$  a intensidade da luz e  $I_s$  a intensidade ótima, ambas na mesma unidade.  $K_e$  é o coeficiente de extinção da luz ( $\text{m}^{-1}$ ), que é função do material particulado e da própria concentração de algas, pois quanto maior sua quantidade, maior será a dificuldade de penetração da luz. Assim,  $K_e$  pode ser descrito da seguinte forma:

$$K_e = K'_e + 0,0088C_{P_w} + 0,054C_{P_w}^{2/3} \quad (3.8)$$

e  $K'_e$  é o coeficiente de extinção da luz devido à outras partículas que não o fitoplâncton cujo valor típico para reservatórios é  $0,3 \text{ m}^{-1}$  (Rosman, 2012).

### 3. Efeito dos Nutrientes

Os nutrientes atuam como um fator limitante sobre o crescimento do fitoplâncton:

$$G(N) = \min \left\{ \frac{N_1}{K_{mN_1} + N_1}; \frac{N_2}{K_{mN_2} + N_2}; \dots \right\} \quad (3.9)$$

Em Chapra (1997) foram considerados como fatores limitantes apenas o fósforo e o nitrogênio. No entanto, para este trabalho, desconsideraremos este efeito, já que não serão modeladas as concentrações destes compostos.

A expressão para o consumo de OD pela morte/respiração do fitoplâncton é dividida em três partes:

$$D_P = D_{P1}(T) + D_{P2} + D_Z, \quad (3.10)$$

em que  $D_{P1}(T)$  é a taxa de perda por respiração e excreção, função da temperatura,  $D_{P2}$  a taxa de mortalidade propriamente dita e  $D_Z$  é a perda por predação pelo zooplâncton herbívoro (considerado aproximadamente nulo neste trabalho).  $D_{P1}$  deve ser corrigido pela temperatura  $T$  da água, utilizando-se a taxa de morte/excreção a 20 °C ( $D_{P1,20}$ ) e o fator de correção ( $\theta_{DP1}$ ). Assim, temos:

$$D_P = D_{P1,20}\theta_{DP1}^{(T-20)} + D_{P2} \quad (3.11)$$

Conforme será descrito na seção 3.4.1 as condições de contorno devem indicar um fluxo entre a superfície e a atmosfera e entre o fundo e o sedimento. Para o OD, as condições de contorno são dadas por:

$$K_H \frac{\partial C_{O_w}}{\partial z} \Big|_{z=0} = k_{O_{ar}}(C_{O_{sat}} - C_{O_w}) \quad (3.12)$$

$$K_H \frac{\partial C_{O_w}}{\partial z} \Big|_{z=H} = k_{O_{ws}}(C_{O_{sed1}} - C_{O_w}) \quad (3.13)$$

em que  $k_{O_{ar}}$  e  $k_{O_{ws}}$  são as velocidades de reaeração e de troca de OD do sedimento com a coluna d'água, respectivamente ( $\text{m s}^{-1}$ ).  $C_{O_{sed1}}$  é a concentração de OD na primeira camada de sedimento ( $\text{mg m}^{-3}$ ). A concentração de saturação do oxigênio ( $C_{O_{sat}}$ ,  $\text{mg m}^{-3}$ ) é a concentração estabelecida para que haja um equilíbrio entre o corpo d'água e a atmosfera, de acordo com a lei de Henry. Segundo Chapra (1997), geralmente essa concentração é da ordem de  $10 \text{ mg l}^{-1}$ . No entanto, este valor pode ser alterado por alguns fatores ambientais como a temperatura, salinidade e pressão atmosférica. Assim, para cada um destes fatores, descrevemos abaixo as expressões para  $C_{O_{sat}}$  (Chapra, 1997):

1. Temperatura:

$$\ln(C_{O_{sat,T}}) = -139,34411 + \frac{1,575701 \times 10^5}{T_a} - \frac{6,642308 \times 10^7}{T_a^2} + \frac{1,243800 \times 10^{10}}{T_a^3} - \frac{8,621949 \times 10^{11}}{T_a^4} \quad (3.14)$$

em que  $T_a$  é a temperatura absoluta da superfície da água (K) e  $C_{O_{sat,T}}$  é concentração de saturação do OD em função da temperatura ( $\text{mg m}^{-3}$ ).

2. Salinidade:

$$\ln(C_{O_{sat,S}}) = \ln(C_{O_{sat,T}}) - S \left( 1,7674 \times 10^{-2} - \frac{1,0754 \times 10^1}{T_a} + \frac{2,1407 \times 10^3}{T_a^2} \right) \quad (3.15)$$

em que  $C_{O_{sat,S}}$  é concentração de saturação do OD função da salinidade ( $\text{mg m}^{-3}$ ) e  $S$  é salinidade ( $\text{gl}^{-1}$  ou ppt). A salinidade ainda pode ser relacionada com a concentração de cloreto ( $Chl$ , ppt):

$$S = 1,80655 \times Chl \quad (3.16)$$

3. Efeito de Pressão:

O efeito da pressão pode ser dado por uma aproximação, dada apenas em função da concentração de oxigênio a 1 atm (dependente da temperatura, expressão 3.14) e da elevação ( $Z_{sl}$ ) em relação ao nível do mar (km).

$$C_{O_{sat,P}} = C_{O_{sat,T}}(1 - 0,1148Z_{sl}) \quad (3.17)$$

Assim, combinando as expressões (3.14), (3.15) e (3.17), temos:

$$C_{O_{sat}} = \exp \left\{ -139,34411 + \frac{1,575701 \times 10^5}{T_a} - \frac{6,642308 \times 10^7}{T_a^2} + \frac{1,243800 \times 10^{10}}{T_a^3} - \frac{8,621949 \times 10^{11}}{T_a^4} - S \left( 1,7674 \times 10^{-2} - \frac{1,0754 \times 10^1}{T_a} + \frac{2,1407 \times 10^3}{T_a^2} \right) \right\} - 0,1148Z_{sl} \quad (3.18)$$

A velocidade de reaeração ( $k_{Oar}$ ) possui diversas formulações para cada tipo de corpo d'água.

Dentre os vários modelos apresentados por Chapra (1997), utilizaremos a formulação proposta por Wanninkhof et al. (1991), que é a mais utilizada pelos modelos de qualidade de água (Rosman, 2012 e Chapra et al., 2008). Note-se que esta expressão é função apenas da velocidade do vento, pois para lagos este é o principal forçante a causar turbulência suficiente que permita a intrusão de oxigênio na água.

$$\begin{aligned}
 k_{Oar} &= 0,108w_{10}^{1,64} \left( \frac{S_{ch}}{600} \right)^{0,5} \text{ m dia}^{-1} \\
 &= 0,0986w_{10}^{1,64} \text{ m dia}^{-1} \\
 &= 1,141204 \times 10^{-6}w_{10}^{1,64} \text{ m s}^{-1}
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

em que a  $w_{10}$  é a velocidade do vento ( $\text{m s}^{-1}$ ) medida a 10 metros de altura e  $S_{ch}$  é o número de Schmidt, dado como aproximadamente 500 para oxigênio na água.

### 3.2.3 Carbono Orgânico Dissolvido

Neste texto, distinguiremos dois tipos de matéria orgânica; aquela formada pelo carbono pronto a ser consumido pelas bactérias, chamado aqui de Carbono Orgânico Dissolvido (COD) e o Particulado (COP, seção 3.2.4), que será fruto direto da lixiviação de galhos e plantas e da morte de algas.

O COD pode ser interpretado como demanda bioquímica de oxigênio (DBO) na maioria dos modelos de qualidade da água, mas aqui ele será expresso em massa de carbono/unidade de volume. Essa é a matéria orgânica que servirá de alimento para as bactérias, formando  $\text{CO}_2$  ou  $\text{CH}_4$ . O termo  $R_x$  da equação (3.2) para o COD, fica:

$$R_{C_{1w}} = k_{hid_2}C_{C_{2w}} + k_{hid_3}C_{C_{3w}} - (k_{d_1} + k_{M_1})C_{C_{1w}} - v_{sed} \frac{\partial C_{C_{1w}}}{\partial z} \tag{3.20}$$

em que  $C_{1w}$ ,  $C_{2w}$  e  $C_{3w}$  são, respectivamente, as concentrações de COD e COP lábil e refratário na água e  $k_{hid_2}$  e  $k_{hid_3}$  suas taxas de hidrólise.  $k_{d_1}$  e  $k_{M_1}$  são as taxas de consumo do COD ( $\text{s}^{-1}$ ) e  $v_{sed}$  é a velocidade de sedimentação da matéria orgânica ( $\text{m s}^{-1}$ ). Os dois primeiros termos da equação (3.20) representam a transformação do COP em COD segundo taxas específicas de hidrólise, ou seja, quebra de cadeias mais complexas para menos complexas, de forma que



possam ser consumidas. O terceiro termo refere-se à formação de  $\text{CO}_2$  ou  $\text{CH}_4$  a partir do consumo da matéria orgânica por bactérias. É importante verificar aqui que este consumo se dará por um ou outro, não pelos dois, já que  $k_{d_1}$  indica a velocidade de consumo pelas bactérias aeróbias e  $k_{M_1}$  pelas anaeróbias. O último termo se refere à sedimentação, que levará parte deste composto ao fundo do reservatório. A taxa de oxidação de matéria orgânica ( $k_{d_1}$ ) é influenciada pela temperatura e disponibilidade de OD (Rosman, 2012). Já a taxa de consumo anaeróbia será função apenas da temperatura, dado que esta ocorre apenas na ausência de OD. A formulação para estes dois parâmetros é:

$$\text{se } \begin{cases} C_{O_w} \neq 0 : k_{d_1} = k_{d_1,20} \theta_{d_1}^{(T-20)} \left( \frac{C_O}{K_{Hd} + C_O} \right), & k_{M_1} = 0 \\ C_{O_w} = 0 : k_{d_1} = 0, k_{M_1} = k_{M_1,20} \theta_{M_1}^{(T-20)} \end{cases} \quad (3.21)$$

em que  $k_{d_1,20}$  e  $k_{M_1,20}$  são as taxas a  $20^\circ\text{C}$ ,  $\theta_{d_1}$  e  $\theta_{M_1}$  são os fatores de correção para a temperatura e  $K_{Hd}$  é a constante de meia saturação para o consumo de carbono orgânico ( $\text{mg m}^{-3}$ ).

As condições de contorno para este composto serão: fluxo nulo com a atmosfera, já que este permanece dissolvido na água e no fundo dada pela sedimentação:

$$K_H \frac{\partial C_{C_{1w}}}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0 \quad (3.22)$$

$$K_H \frac{\partial C_{C_{1w}}}{\partial z} \Big|_{z=H} = -v_{sed} C_{C_{1w}} \quad (3.23)$$

### 3.2.4 Carbono Orgânico Particulado

O carbono orgânico particulado (COP) é o composto advindo da morte/lixiviação de algas, plantas ou qualquer outra matéria orgânica até se transformar em COD, pronto a ser consumido. Esta espécie está dividida em duas partes, COP lábil e COP refratário. A primeira sofre hidrólise de forma rápida para COD e assim ser consumida pelas bactérias, enquanto que a segunda pode levar muito mais tempo para se converter já que é proveniente de galhos, por exemplo.

Assim, para sua formação é necessário conhecer a que taxa ocorre a morte do fitoplâncton e também a geração de matéria orgânica por outras fontes. Os termos  $R_x$  da equação (3.2), para

o COP lábil e refratário, respectivamente, ficam:

$$R_{C_{2w}} = r_{ca}D_P C_{Pw} + k_{lix_2}C_l - k_{hid_2}C_{C_{2w}} - v_{sed}\frac{\partial C_{C_{2w}}}{\partial z} \quad (3.24)$$

$$R_{C_{3w}} = k_{lix_3}C_b - k_{hid_3}C_{C_{3w}} - v_{sed}\frac{\partial C_{C_{3w}}}{\partial z} \quad (3.25)$$

em que  $k_{lix_2}$  e  $k_{lix_3}$  são as taxas de lixiviação da matéria orgânica proveniente das folhas e dos galhos ( $C_l$  e  $C_b$ ).

As condições de contorno são similares às do COD:

$$K_H\frac{\partial C_{C_{2w}}}{\partial z}\Big|_{z=0} = K_H\frac{\partial C_{C_{3w}}}{\partial z}\Big|_{z=0} = 0 \quad (3.26)$$

$$K_H\frac{\partial C_{C_{2w}}}{\partial z}\Big|_{z=H} = -v_{sed}C_{C_{2w}} \quad (3.27)$$

$$K_H\frac{\partial C_{C_{3w}}}{\partial z}\Big|_{z=H} = -v_{sed}C_{C_{3w}} \quad (3.28)$$

### 3.2.5 Carbono Inorgânico/Dióxido de Carbono

Neste ponto iremos analisar um dos produtos finais deste trabalho, a emissão de um dos gases de efeito estufa, o dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ). Para isso, devemos conhecer sua concentração na água e a partir do equilíbrio com a atmosfera verificar se este será emitido ou capturado pelo corpo d'água. Como já foi dito, sua formação é resultado do consumo da matéria orgânica (COD) pelas bactérias aeróbias, ou seja, apenas na presença de OD, mas pode ser produzido também pelas bactérias metanotróficas.  $\text{CO}_2$  também é gerado a partir da respiração do fitoplâncton ou consumido na fotossíntese. O termo  $R_\chi$  da equação (3.2), para o  $\text{CO}_2$  fica:

$$R_{C_{Iw}} = k_{d_1}C_{C_{1w}} + r_{ca}(D_P - G_P)C_{Pw} + k_M C_{Mw} \quad (3.29)$$

em que  $k_M$  é a taxa de oxidação do metano ( $\text{s}^{-1}$ ) e  $C_{Mw}$  sua concentração na coluna d'água ( $\text{mg m}^{-3}$ ).

Da mesma forma que ocorre com o consumo da matéria orgânica, proporcionalmente à sua taxa de consumo ( $k_{d_1}$ ), o consumo do metano, para formação do  $\text{CO}_2$ , se dará somente na

presença de OD. Assim, podemos definir a taxa de consumo do metano como:

$$k_M = k_{M,20} \theta_M^{(T-20)} \left( \frac{C_{O_w}}{K_{HM} + C_{O_w}} \right) \quad (3.30)$$

em que  $k_{M,20}$  é a taxa de consumo a 20 °C,  $\theta_M$  é o fator de correção para a temperatura e  $K_{HM}$  é a constante de meia saturação para o consumo do metano.

As condições de contorno são semelhantes às do OD, ou seja, troca (fluxo) com a atmosfera e difusão com o sedimento no fundo:

$$K_H \frac{\partial C_{C_{Iw}}}{\partial z} \Big|_{z=0} = k_{Iar} (C_{C_{I_{sat}}} - C_{C_{Iw}}) \quad (3.31)$$

$$K_H \frac{\partial C_{C_{Iw}}}{\partial z} \Big|_{z=H} = k_{Iws} (C_{C_{I_{sed1}}} - C_{C_{Iw}}) \quad (3.32)$$

em que  $C_{C_{Iw}}$ ,  $C_{C_{I_{sed1}}}$  e  $C_{C_{I_{sat}}}$  são as concentrações na água, no sedimento e de saturação para o CO<sub>2</sub> (mg m<sup>-3</sup>).  $k_{Iar}$  e  $k_{Iws}$  são as velocidades de troca do CO<sub>2</sub> com a atmosfera e o sedimento (m s<sup>-1</sup>).

A concentração de saturação de CO<sub>2</sub>, em mg l<sup>-1</sup>, pode ser obtida pela lei de Henry (Chapra, 1997 e Chapra et al., 2008):

$$C_{C_{I_{sat}}} = K_{Hen} p_{CO_2} 44 \times 10^3 \frac{\text{mg}}{\text{mol}} \quad (3.33)$$

em que  $p_{CO_2}$  é a pressão parcial do CO<sub>2</sub> (atm) na atmosfera ( $370 \times 10^{-6}$  atm, NOAA, 2015) e  $K_{Hen}$  é o coeficiente de Henry (mol l<sup>-1</sup>atm<sup>-1</sup>), dado por:

$$pK_{Hen} = \frac{-2385,73}{T_a} - 0,0152642T_a + 14,0184 \quad (3.34)$$

$$K_{Hen} = 10^{-pK_H} \quad (3.35)$$

A velocidade de troca (“reaeração”) do CO<sub>2</sub> pode ser dada em função da velocidade de reaeração do oxigênio dissolvido e da massa molar do CO<sub>2</sub> (Chapra, 1997 e Chapra et al., 2008):

$$k_{Iar} = k_{Oar} \left( \frac{32}{M_{CO_2}} \right)^{0,25} = 0,923k_{oar} \quad (3.36)$$

### 3.2.6 Metano

O próximo gás de efeito estufa, e último composto, a ser avaliado nesta modelagem é o metano. Este gás será formado apenas quando da ausência de OD na água (ou no sedimento, como será visto na seção 3.3).

O termo  $R_{\chi}$  da equação (3.2), para o  $\text{CH}_4$  fica:

$$R_{M_I} = k_{M_1} C_{C_{1w}} - k_M C_{M_w} \quad (3.37)$$

As condições de contorno são semelhantes às do OD e  $\text{CO}_2$ , ou seja, troca (fluxo) com a atmosfera e difusão com o sedimento no fundo:

$$K_H \frac{\partial C_{M_w}}{\partial z} \Big|_{z=0} = k_{Mar} (C_{M_{sat}} - C_{M_w}) \quad (3.38)$$

$$K_H \frac{\partial C_{M_w}}{\partial z} \Big|_{z=H} = k_{Mws} (C_{M_{sed1}} - C_{M_w}) \quad (3.39)$$

em que  $C_{C_{1w}}$ ,  $C_{M_{sed1}}$  e  $C_{M_{sat}}$  são as concentrações na água, no sedimento e de saturação para o  $\text{CH}_4$  ( $\text{mg m}^{-3}$ ).  $k_{Mar}$  e  $k_{Mws}$  são as velocidades de troca do  $\text{CH}_4$  com a atmosfera e o sedimento ( $\text{m s}^{-1}$ ). Da mesma forma que na expressão (3.36), podemos definir  $k_{Mar}$  como:

$$k_{Mar} = k_{Oar} \left( \frac{32}{M_{\text{CH}_4}} \right)^{0,25} = 1,189 k_{Oar} \quad (3.40)$$

De maneira análoga ao  $\text{CO}_2$ , podemos obter a concentração de saturação do metano pela pressão parcial do gás na atmosfera ( $1,77 \times 10^{-6}$  atm, NOAA, 2015) e pelo coeficiente de Henry (equação 3.34):

$$C_{M_{sat}} = K_{Hen} p_{\text{CH}_4} 16 \times 10^3 \frac{\text{mg}}{\text{mol}} \quad (3.41)$$

### 3.3 Balanços no Sedimento

Para se trabalhar com o sedimento, será dada uma abordagem levemente diferente em relação à água. Serão usadas equações baseadas no trabalho de Sharifi et al. (2013), em que é dado um enfoque importante no sedimento, já que esta é uma parte significativa das *wetlands*, objeto de estudo dos autores.

Da mesma forma que foi feito ali, a modelagem do sedimento considerará duas camadas, uma chamada aeróbia, em contato direto com a água acima e que ainda sofre os efeitos de oxidação (caso esta não esteja em anoxia) e outra mais abaixo, dita anaeróbia, onde ocorrerão os processos de metanogênese, entre outros. O sedimento desempenha outro importante papel, o processo de enterramento da matéria orgânica, que é a saída do carbono do sistema (sedimento ativo), conforme a camada de sedimento torna-se mais espessa. Este efeito deve representar o acúmulo (aprisionamento, captura) de carbono orgânico que assim não mais participará das reações cinéticas.

As equações para as duas camadas de sedimento serão do tipo diferencial ordinária com dependência temporal apenas, ou seja, as camadas serão tratadas como compartimentos distintos, bem misturados espacialmente e com as trocas se dando através das fronteiras. A figura 3.3 mostra, com mais clareza, como serão estes processos. Note-se aqui que não há referência aos fluxos difusivos das espécies na água com a atmosfera, já que estes compartimentos representam a condição de contorno no fundo, ou seja, as concentrações na última camada da coluna d'água. Maiores detalhes destes processos podem ser vistos na figura 3.2.

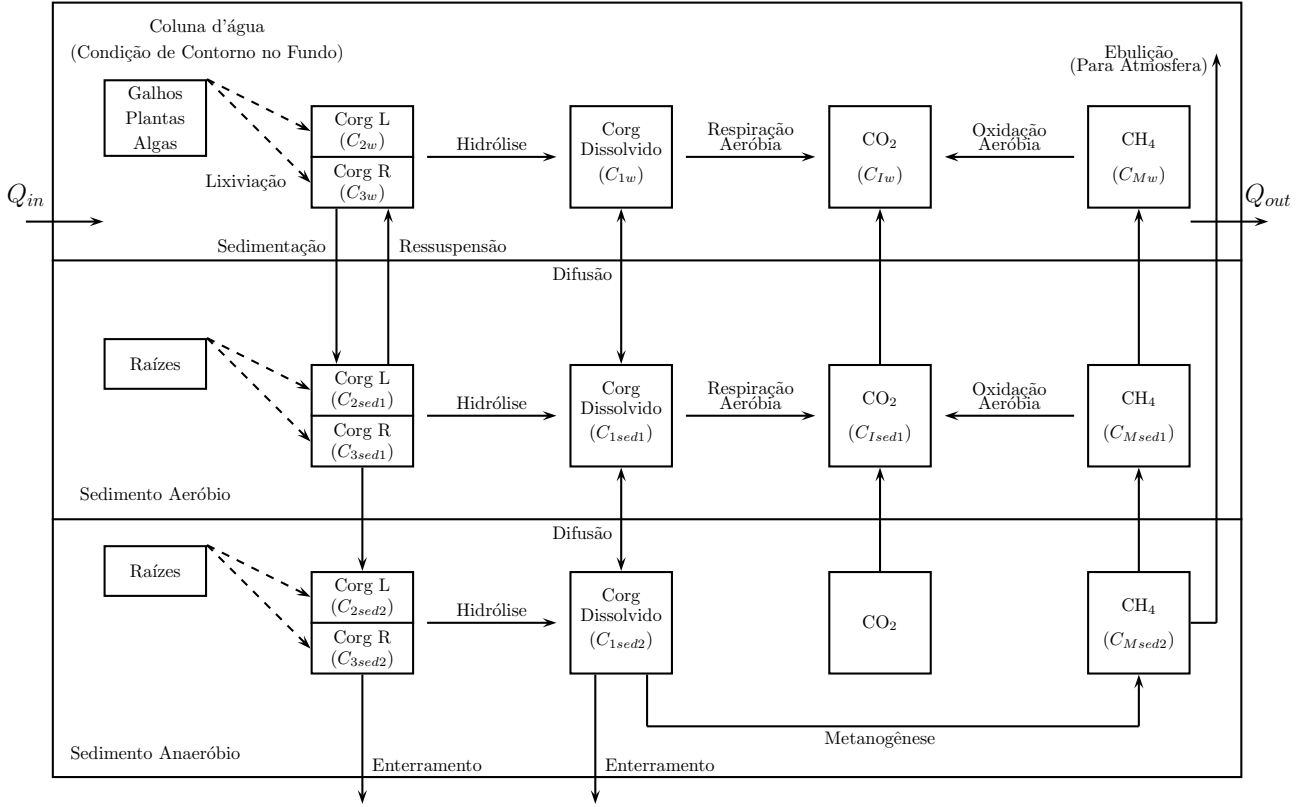


Figura 3.3: Esquema dos processos que ocorrem no sedimento, dividido em suas camadas aeróbias e anaeróbias. Corg: carbono orgânico, L: lábil e R: refratário.

### 3.3.1 Camada Aeróbia

Nesta camada, que está em contato direto com a coluna d'água acima, e portanto pode ainda sofrer a influência do oxigênio dissolvido, é onde ocorrem os efeitos de oxidação da matéria orgânica e do metano vindo da camada anaeróbia do sedimento. A matéria orgânica que ainda não foi transformada pode também ser trocada por processos difusivos com a camada inferior e com a coluna d'água (substâncias dissolvidas) e por ressuspensão (substâncias particuladas). As equações a seguir mostram como os três compostos de carbono orgânico interagem, assim como o dióxido de carbono (carbono inorgânico).

$$V_{s1} \frac{dC_{2sed1}}{dt} = k_{db} f_1 f_{bs} f_{bL} b - V_{s1} k_{hid2} C_{2sed1} + f_1 v_{sed} A_s C_{2w} - f_1 v_r A_s C_{2sed1} - v_b A_{sed} C_{2sed1} \quad (3.42)$$

$$V_{s1} \frac{dC_{3sed1}}{dt} = k_{db} f_1 f_{bs} f_{bR} b - V_{s1} k_{hid3} C_{3sed1} + f_1 v_{sed} A_s C_{3w} - f_1 v_r A_s C_{3sed1} - v_b A_s C_{3sed1} \quad (3.43)$$

$$\phi V_{s1} \frac{dC_{1sed1}}{dt} = k_{db} f_1 f_{bs} f_{bD} b + V_{s1} (k_{hid_2} C_{2sed1} + k_{hid_3} C_{3sed1}) - \beta_{D1} A_s (C_{1sed1} - C_{C_{1w}}) - \beta_{D2} A_s (C_{1sed1} - C_{1sed2}) - \phi V_{s1} k_{d1} C_{1sed1} - \phi v_b A_s C_{1sed1} \quad (3.44)$$

$$\phi V_{s1} \frac{dC_{Ised1}}{dt} = \phi V_{s1} (k_{d1} C_{1sed1} + k_M C_{Msed1}) - \beta_{D1} A_s (C_{Ised1} - C_{C_{1w}}) - \beta_{D2} A_s (C_{Ised1} - C_{Ised2}) \quad (3.45)$$

em que  $C_{2sed1}$ ,  $C_{3sed1}$  e  $C_{1sed1}$  são, respectivamente, as concentrações de carbono orgânico lábil, refratário e dissolvido na camada 1 (aeróbia do sedimento) ( $\text{mg m}^{-3}$ ). As concentrações na água<sup>3</sup>, destes mesmos compostos, são  $C_{2w}$ ,  $C_{3w}$  e  $C_{1w}$  ( $\text{mg m}^{-3}$ ).  $V_{s1}$  é o volume da camada 1 do sedimento ( $\text{m}^3$ ),  $k_{db}$  é a taxa de morte das plantas (enraizadas) no sedimento ( $\text{dia}^{-1}$ ),  $f_1$  é a fração volumétrica aeróbia da camada ativa de solo,  $f_{bs}$  é a fração da biomassa das plantas e  $b$  sua massa ( $\text{mgC}$ ).  $f_{bL}$ ,  $f_{bR}$  e  $f_{bD}$  são as frações da biomassa produzidas pela mortes das plantas, respectivamente para a parte lábil, refratária e dissolvida. Seu somatório é igual a 1.  $k_{hid_2}$  e  $k_{hid_3}$  são as taxas de hidrólise da matéria lábil e refratária, respectivamente ( $\text{dia}^{-1}$ ). A velocidade de enterramento é  $v_b$  ( $\text{m s}^{-1}$ ) e  $A_s$  é a área superficial do sedimento ( $\text{m}^2$ ).

Além disso, na equação (3.44) as variáveis  $\beta_{D1}$  e  $\beta_{D2}$  são taxas difusivas de transferência de massa, respectivamente, entre a água e o sedimento aeróbio e entre o sedimento aeróbio e anaeróbio ( $\text{m s}^{-1}$ ). Finalmente,  $\phi$  é a porosidade do sedimento.

Nas equações (3.42) e (3.43) pode-se notar termos semelhantes a menos dos índices 2 e 3 que estão relacionados ao carbono orgânico particulado lábil e refratário, respectivamente. No lado direito da equação, o primeiro termo destas duas equações está relacionado à fragmentação das raízes das plantas. O segundo termo é a hidrólise que transforma estes compostos em carbono orgânico dissolvido (equação 3.44). O terceiro e quarto termos são, respectivamente, a sedimentação e a ressuspensão. O quinto termo é o enterramento para a camada anaeróbia.

Na equação (3.44) nota-se que o primeiro termo é análogo ao já descrito acima. O segundo termo são fontes provenientes da hidrólise (negativo nas duas primeiras equações). O terceiro e quarto termos são, respectivamente, a difusividade entre a camada aeróbia e a coluna d'água e entre as duas camadas de sedimento. O quinto termo é a oxidação da matéria orgânica, que

---

<sup>3</sup>É importante notar que quando se fala em concentrações na água, estamos nos referindo à camada de água imediatamente acima do sedimento, já que aquele compartimento possui concentrações variando no espaço. Esta ressalva é importante sempre que se fala destas concentrações nas equações do sedimento, pois Sharifi et al. (2013) consideram que a concentração na água é uniforme, diferentemente do que é feito aqui.

será fonte para a formação de CO<sub>2</sub>. O último termo é o enterramento.

A equação (3.45) se refere à formação de dióxido de carbono, processo que ocorre exclusivamente na camada aeróbia, já que a presença de oxigênio é fundamental. O primeiro termo se refere à formação devido à decomposição do carbono orgânico dissolvido (equação 3.44) e do metano (3.51). Os dois últimos termos são a troca difusiva com a coluna d'água e o sedimento anaeróbio, respectivamente.

### 3.3.2 Camada Anaeróbia

Apresenta-se, na sequência, o equacionamento para os compostos de carbono orgânico lábil, refratário e dissolvido na camada anaeróbia do sedimento.

$$V_{s2} \frac{dC_{2sed2}}{dt} = k_{db} f_2 f_{bs} f_{bL} b - V_{s2} k_{hid2} C_{2sed2} + f_2 v_{sed} A_s C_{2w} - f_2 v_r A_s C_{2sed2} - v_b A_s (C_{2sed2} - C_{2sed1}) \quad (3.46)$$

$$V_{s2} \frac{dC_{3sed2}}{dt} = k_{db} f_2 f_{bs} f_{bR} b - V_{s2} k_{hid3} C_{3sed2} + f_2 v_{sed} A_s C_{3w} - f_2 v_r A_s C_{3sed2} - v_b A_s (C_{3sed2} - C_{3sed1}) \quad (3.47)$$

$$\phi V_{s2} \frac{dC_{1sed2}}{dt} = k_{db} f_2 f_{bs} f_{bD} b + V_{s2} (k_{hid2} C_{2sed2} + k_{hid3} C_{3sed2}) - \beta_{D2} A_s (C_{1sed2} - C_{1sed1}) - \phi V_{s2} k_{M1} C_{1sed2} - \phi v_b A_s (C_{1sed2} - C_{1sed1}) \quad (3.48)$$

Aqui nota-se que  $V_{s2}$  é o volume do sedimento anaeróbio (m<sup>3</sup>),  $f_2$  é a fração volumétrica anaeróbia da camada ativa de solo. As concentrações nesta camada do carbono orgânico lábil, refratário e dissolvido são, respectivamente,  $C_{2sed2}$ ,  $C_{3sed2}$  e  $C_{1sed2}$  (kgm<sup>-3</sup>).

Os valores  $f_1$  e  $f_2$  podem ser calculados da seguinte forma:

$$f_1 = \frac{l_1}{l_1 + l_2} \quad (3.49)$$

$$f_2 = \frac{l_2}{l_1 + l_2} \quad (3.50)$$

em que  $l_1$  e  $l_2$  são, respectivamente, as espessuras das camadas aeróbia e anaeróbia (m).



As equações (3.46) e (3.47) são absolutamente análogas às equações (3.42) e (3.43), respectivamente (assim como suas variáveis), a menos do índice *sed2*, que as indica na camada anaeróbia ao invés da camada aeróbia. Da mesma forma, nota-se a analogia entre o primeiro, segundo, terceiro e último termos das equações (3.48) e (3.44) e suas variáveis. A parte ligeiramente diferente é a de formação de CO<sub>2</sub> (metanogênese), dada pelo quarto termo.

### 3.3.3 Metano

Nesta seção é detalhada a formulação para o metano. O metano irá se formar na ausência de oxigênio, devido à respiração anaeróbia de certas bactérias e isso pode acontecer tanto na água (em alguma região anóxica, geralmente no hipolímnio de lagos bem estratificados) quanto no sedimento.

Como neste trabalho o sedimento é dividido em duas camadas e essa condição de divisão é dada justamente pela ausência de oxigênio, consideraremos aqui que o metano somente será formado na camada anaeróbia. No entanto, não há nada que impeça o metano de interagir na outra camada e na água. Ali haverá uma perda deste composto dada pela oxidação, que será melhor vista adiante. Na sequência são apresentadas as equações para o metano nas duas camadas de sedimento.

$$\phi V_{s1} \frac{dC_{Msed1}}{dt} = \beta_{M1} A_s (C_{Mw} - C_{Msed1}) + \beta_{M2} A_s (C_{Msed2} - C_{Msed1}) - \phi V_{s1} k_M C_{Msed1} \quad (3.51)$$

$$\phi V_{s2} \frac{dC_{Msed2}}{dt} = \phi V_{s2} k_{M1} C_{1sed2} + \beta_{M2} A_s (C_{Msed1} - C_{Msed2}) \quad (3.52)$$

em que  $C_{Msed1}$  e  $C_{Msed2}$  são as concentrações de metano dissolvido na água do sedimento aeróbio e anaeróbio, respectivamente,  $C_{Mw}$  é a concentração na água ( $\text{kgm}^{-3}$ ),  $\beta_{M1}$  e  $\beta_{M2}$  são as taxas difusivas de transferência de massa, respectivamente, entre a água e o sedimento aeróbio e anaeróbio ( $\text{m s}^{-1}$ ).

Em ambos os casos, ao final de cada passo da simulação, é feita uma verificação da concentração de metano gerada. Se este valor exceder uma certa concentração de saturação, o excedente será enviado através de bolhas, diretamente para a atmosfera e a concentração será

igual a este valor máximo. Desta forma é possível calcular o fluxo de metano ebulitivo ( $i = 1$  ou  $2$  para cada uma das camadas):

$$\begin{aligned} &\text{Se } C_{M_{sedi}} > C_{M_{sedi}}^{eq}, \\ &\text{então:} \\ J_{EbM_{sedi}} &= \frac{(C_{M_{sedi}} - C_{M_{sedi}}^{eq})\phi V_{si}}{A_s \Delta t} \end{aligned} \quad (3.53)$$

e

$$C_{M_{sedi}} = C_{M_{sedi}}^{eq}$$

A concentração máxima de saturação ( $\text{molm}^{-3}$ ), ainda segundo Sharifi et al. (2013), pode ser calculada em função da pressão atmosférica mais a pressão hidrostática ( $p_i$ , Pa), da constante universal dos gases ( $R = 8,3145 \text{ m}^3\text{PaK}^{-1}\text{mol}^{-1}$ ), da temperatura absoluta da água ( $T_a$ , K) e do coeficiente de solubilidade de Bunsen ( $S_B$ , adimensional):

$$C_{M_{sedi}}^{eq} = \frac{p_i S_B}{RT_a} \quad (3.54)$$

$$p_i = p_{atm} + \rho g z \quad (3.55)$$

$$S_B = 0,05708 - 0,001545T_a + 0,00002069T_a^2 \quad (3.56)$$

em que  $\rho$  é a densidade da água,  $p_{atm}$  é a pressão atmosférica,  $g$  a aceleração da gravidade e  $z$  a profundidade média do reservatório, dada por:

$$z = \begin{cases} h + \frac{l_1}{2}, & i = 1 \\ h + l_1 + \frac{l_2}{2}, & i = 2 \end{cases} \quad (3.57)$$

O metano, após ser formado pode alcançar a atmosfera por três formas: (i) a absorção pelas plantas enraizadas no sedimento e que eventualmente alcançam a superfície através da planta (não considerado neste trabalho), (ii) difusão molecular do sedimento para a água e depois desta para a atmosfera e (iii) lançamento de bolhas diretamente do sedimento, sem interação com a água.

Observando-se o segundo ponto, percebe-se a importância de se conhecer bem as interações

do metano com regiões óxicas (sedimento aeróbio e coluna d'água), já que pode haver uma perda de até 90% deste composto devido à oxidação pelas bactérias metanotróficas (Rudd e Taylor, 1980).

Nas equações mostradas, os índices  $sed1$ ,  $sed2$  e  $w$  representam, respectivamente, o sedimento aeróbio, anaeróbio e a coluna d'água (vide nota de rodapé 3). O primeiro termo do lado direito da equação (3.51) é dado pela difusão molecular com a água acima e o segundo com o sedimento abaixo. O terceiro termo refere-se à oxidação, que formará  $CO_2$ . Já na equação (3.52) o primeiro termo refere-se à metanogênese e o segundo à difusão com o sedimento acima.

### 3.4 Discretização e Solução Numérica

Sabe-se que a não-linearidade das equações utilizadas na descrição dos processos descritos acima impede o uso de soluções analíticas, nos levando à necessidade de uma solução numérica, que para ser a melhor possível (tanto em termos de acurácia quanto de esforço computacional) passará pela escolha do método numérico a ser utilizado. Existem vários métodos de aproximação de equações diferenciais parciais, que é o caso neste trabalho, sendo alguns deles discutidos na sequência, dando-se particular atenção a soluções numéricas para problemas similares ao abordado neste trabalho (qualidade da água e balanços de carbono em reservatórios). Vários destes trabalhos foram revistos na seção 2.3.

Männich (2013) apresentou, um modelo de temperatura acoplado a um modelo de balanço de carbono, ambos discretizados na vertical e integrados nas direções longitudinal e transversal. Ambos os modelos resolveram as equações através do método de volumes finitos, com solução implícita pelo método de Crank-Nicolson.

Polli (2014) também desenvolveu um modelo de evolução térmica para reservatórios, para a direção vertical. No trabalho foram testados três métodos de solução numérica, o método de diferenças finitas explícito, implícito e o de volumes finitos. De acordo com a autora, o melhor resultado obtido foi utilizando-se o último, e o critério para esta escolha foi o fato deste conservar energia, obtendo-se uma correlação de 0,86, 0,87 e 0,99, respectivamente, entre a energia na coluna d'água e na superfície da água. Além disso, a energia acumulada ao longo do processamento na interface não acompanhou a da coluna para os dois primeiros.

O modelo de qualidade de água e hidrodinâmica CE-QUAL-W2 (Cole e Wells, 2015) utiliza o método de solução numérica implícito para a superfície livre da água enquanto que para a solução da quantidade de movimento horizontal este permite ao usuário escolher entre os métodos implícito ou explícito. A difusão vertical (modelo de temperatura) é resolvida pelo método implícito enquanto que as equações de transporte (qualidade de água) são resolvidas pelo método *upwind* desde a primeira versão, que foi posteriormente melhorado pelo esquema QUICKEST e ULTIMATE, desenvolvido por Leonard (1991) a fim de se melhorar a acurácia do método, que acaba por inserir uma difusão numérica aos resultados do modelo.

Cancelli (2006) desenvolveu um modelo unidimensional de temperatura em lagos profundos. A autora testou vários métodos de solução e formas de condição de contorno, entre eles o método explícito, de MacCormack e implícito de Crank-Nicolson chegando a conclusão de que os erros dos dois primeiros são equivalentes enquanto que o implícito possui erros tão menores quanto forem os valores de  $\Delta z$  e  $\Delta t$ , apesar deste método ser incondicionalmente estável e menos custoso computacionalmente, já que o primeiro necessita de pequenas discretizações espaciais e temporais para atender o critério de convergência. Além disso, o autor sugere o uso de ponto fictício na condição de contorno para uma melhor acurácia. A autora optou pelo método Crank-Nicolson.

Diante disso, para a escolha do método a ser escolhido, é importante entender que a decisão por um deles não será necessariamente a melhor em todos os sentidos. Há sempre uma solução de compromisso, em que se ganha de um lado e pode-se perder em outros.

Decidimos trabalhar com um modelo semi-implícito, ou seja, um híbrido que contenha etapas implícitas e explícitas. Esta decisão foi tomada devido ao grande número de compostos e interações entre eles. Portanto, ao discretizar as equações pelo método de Crank-Nicolson implícito, teríamos que resolver uma matriz muito complexa a cada passo de tempo, o que poderia inviabilizar o modelo e possivelmente perder-se o que teríamos ganho com a possibilidade de um método incondicionalmente estável.

Assim, a solução a cada passo de tempo será feita de forma que se resolva a matriz de coeficientes de cada um dos escalares, na ordem que aparece na figura 3.4. Esta decisão foi tomada para que se tenha, para cada espécie, uma matriz de banda tridiagonal, que pode ser resolvida de forma mais eficiente.

Vamos supor duas substâncias A e B. Se concentrações de A estão presentes na equação de B e se a primeira estiver em maior ordem de prioridade, será utilizada a concentração do mesmo passo de tempo, mas que foi resolvida independentemente. Caso contrário, ou seja, se B é mais prioritária que A, será utilizada a concentração do passo de tempo anterior. Essa ideia é útil, pois estas concentrações de uma(s) espécie(s) em outra(s) não aparecem como incógnitas a serem resolvidas.

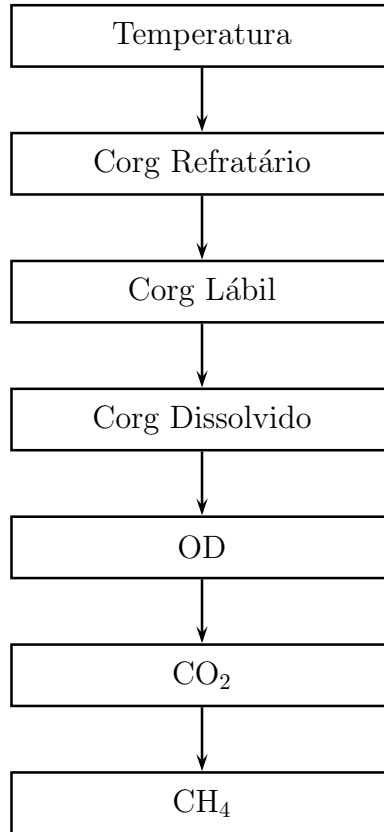


Figura 3.4: Ordem de prioridade na modelagem de cada espécie pelo método semi-implícito.

Assim, a discretização para um composto qualquer é dada a partir da seguinte equação:

$$A(z)\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ K_H(z)A(z)\frac{\partial C}{\partial z} \right] + A(z) \left( \frac{Q_{in}C_{in}}{V} - \frac{Q_{out}C}{V} \pm R \right) \quad (3.58)$$

Utilizaremos aqui diferenças progressivas no tempo e centradas no espaço (figura 3.5), pelo método de Crank-Nicolson em que se utiliza, para a derivada de segunda ordem no espaço, a média entre o gradiente de concentração nos passos de tempo  $(n + 1)$  e  $(n)$ . Com base na discretização utilizada em Cancelli (2006) para a equação da temperatura (similar à 3.58),

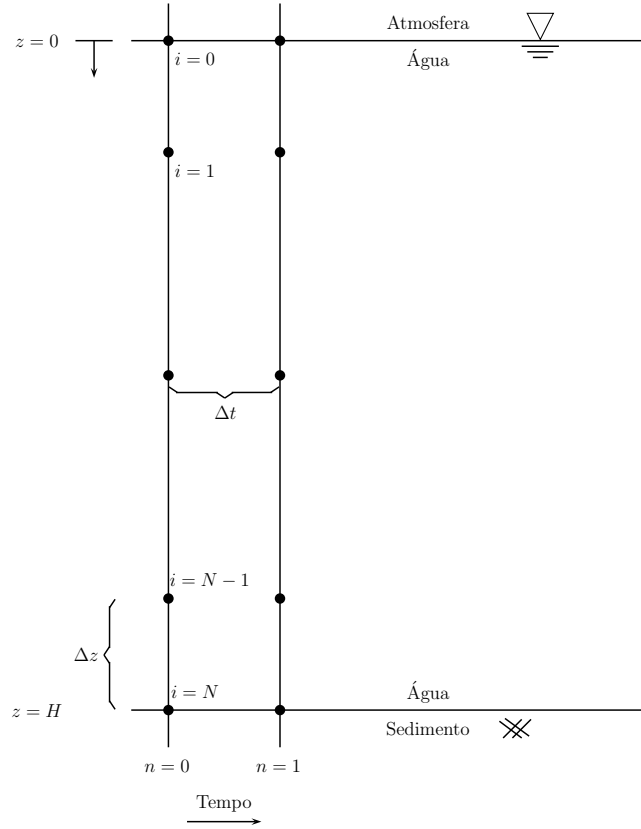


Figura 3.5: Estêncil para discretização utilizando o método de diferenças finitas.

faremos:

$$Y = \frac{\partial}{\partial z} \left[ f(z) \frac{\partial C}{\partial z} \right] + A(z) \left( \frac{Q_{in} C_{in}}{V} - \frac{Q_{out} C}{V} \pm R \right) \quad (3.59)$$

$$f(z) = K_H(z) A(z) \quad (3.60)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{A(z)} \frac{Y^{n+1} + Y^n}{2} \quad (3.61)$$

A discretização espacial para  $Y$  fica:

$$Y = \frac{1}{\Delta z} \left( f_{i+1/2} \frac{C_{i+1} - C_i}{\Delta z} - f_{i-1/2} \frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta z} \right) + A(z) \left[ \frac{Q_{in} C_{in}}{V} - \frac{Q_{out} C}{V} \pm R \right] \quad (3.62)$$

em que:

$$f_{i+1/2} = \frac{f_i + f_{i+1}}{2} \quad (3.63)$$

$$f_{i-1/2} = \frac{f_i + f_{i-1}}{2} \quad (3.64)$$

Além disso, vamos fazer:

$$A(z) = \frac{A^{n+1} + A^n}{2} \quad (3.65)$$

Combinando, finalmente, as quatro últimas expressões, temos:

$$\begin{aligned} C_i^{n+1} = C_i^n + \frac{1}{\frac{A^{n+1}+A^n}{2}} \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{2(\Delta z)^2} & \left\{ (f_i^n + f_{i+1}^n)(C_{i+1}^n - C_i^n) - (f_i^n + f_{i-1}^n)(C_i^n - C_{i-1}^n) + \right. \\ & \left. (f_i^{n+1} + f_{i+1}^{n+1})(C_{i+1}^{n+1} - C_i^{n+1}) - (f_i^{n+1} + f_{i-1}^{n+1})(C_i^{n+1} - C_{i-1}^{n+1}) \right\} - \\ \Delta t \left( \frac{\frac{Q_{out}C_i}{V} |^{n+1} + \frac{Q_{out}C_i}{V} |^n}{2} \right) & + \underbrace{\left[ \left( \frac{\frac{Q_{in}C_{in-i}}{V} |^{n+1} + \frac{Q_{in}C_{in-i}}{V} |^n}{2} \right) \pm \left( \frac{R^{n+1} + R^n}{2} \right) \right]}_{(*)} \Delta t \end{aligned} \quad (3.66)$$

em que o termo com (\*) indica todas as reações que envolvem outras espécies e a concentração de entrada pela vazão  $Q_{in}$  da própria a ser modelada. Se nas reações  $R$  aparecer algum termo relacionado à espécie em questão no passo de tempo  $(n+1)$ , este deverá ser incluído no primeiro termo do lado esquerdo da expressão acima.

Ordenando todos os termos em função de cada concentração no respectivo passo temporal e espacial ( $n+1$  do lado esquerdo e  $n$  do lado direito), temos:

$$\begin{aligned} C_{i-1}^{n+1} [-\alpha_i s (f_{i-1}^{n+1} + f_i^{n+1})] + C_i^{n+1} \left[ 1 + (f_{i+1}^{n+1} + 2f_i^{n+1} + f_{i-1}^{n+1}) \alpha_i s + \frac{\Delta t Q_{out}}{2V} \Big|_i^{n+1} \right] + \\ C_{i+1}^{n+1} [-\alpha_i s (f_i^{n+1} + f_{i+1}^{n+1})] = C_{i-1}^n [\alpha_i s (f_{i-1}^n + f_i^n)] + \\ C_i^n \left[ 1 - (f_{i+1}^n + 2f_i^n + f_{i-1}^n) \alpha_i s - \frac{\Delta t Q_{out}}{2V} \Big|_i^n \right] + C_{i+1}^n [\alpha_i s (f_i^n + f_{i+1}^n)] + * \Delta t \end{aligned} \quad (3.67)$$

em que:

$$s = \frac{\Delta t}{2(\Delta z)^2} \quad (3.68)$$

$$\alpha_i = \frac{1}{A_i^{n+1} + A_i^n} \quad (3.69)$$

Assim, podemos definir para todos os pontos internos do sistema uma equação com a seguinte feição:

$$a_i C_{i-1}^{n+1} + b_i C_i^{n+1} + c_i C_{i+1}^{n+1} = d_i^n \quad (3.70)$$

em que:

$$a_i = -\alpha_i s (f_{i-1}^{n+1} + f_i^{n+1}) \quad (3.71)$$

$$b_i = 1 + (f_{i+1}^{n+1} + 2f_i^{n+1} + f_{i-1}^{n+1}) \alpha_i s + \frac{Q_{out}}{V} \Big|_i^{n+1} \frac{\Delta t}{2} \quad (3.72)$$

$$c_i = -\alpha_i s (f_i^{n+1} + f_{i+1}^{n+1}) \quad (3.73)$$

$$d_i^n = C_{i-1}^n [\alpha_i s (f_{i-1}^n + f_i^n)] + C_i^n \left[ 1 - (f_{i+1}^n + 2f_i^n + f_{i-1}^n) \alpha_i s - \frac{Q_{out}}{V} \Big|_i^n \frac{\Delta t}{2} \right] + C_{i+1}^n [\alpha_i s (f_i^n + f_{i+1}^n)] + * \Delta t \quad (3.74)$$

Nota-se que, ao se passar pelo pontos internos das malhas, teremos um sistema de equações a ser resolvido, mas que haverá mais incógnitas do que equações. Para corrigir isto, temos que definir mais duas equações, que são dadas pelas condições de contorno na superfície e no fundo. Além disso, devido à discretização centrada na derivada de segunda ordem, ao chegar no ponto  $C_0$  e  $C_N$  haverá a necessidade de se determinar concentrações nos pontos  $C_{-1}$  e  $C_{N+1}$ , inexistentes no domínio do problema. A forma de aplicação e discretização destas condições de contorno são melhor explicadas na seção seguinte (3.4.1). Por ora, o que nos interessa é saber que este sistema de equações poderá ser resolvido matricialmente, no seguinte formato:

$$[\mathbf{A}][\mathbf{C}]^{n+1} = [\mathbf{d}]^n \quad (3.75)$$

em que  $\mathbf{A}$  é a matriz de coeficientes ( $a_i$ ,  $b_i$  e  $c_i$ ),  $\mathbf{C}$  é a matriz de concentrações a ser resolvida (incógnitas no passo temporal) e  $\mathbf{d}$  são as constantes e concentrações no passo anterior.

$$\begin{pmatrix} b_0 & c_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ a_1 & b_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & b_2 & c_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \ddots & \ddots & \ddots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{N-2} & b_{N-2} & c_{N-2} & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & a_N & b_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_0^{n+1} \\ C_1^{n+1} \\ \vdots \\ C_i^{n+1} \\ \vdots \\ C_{N-1}^{n+1} \\ C_N^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_0^n \\ d_1^n \\ \vdots \\ d_i^{n+1} \\ \vdots \\ d_{N-1}^n \\ d_N^n \end{pmatrix} \quad (3.76)$$



Resolver a matriz de concentrações  $\mathbf{C}^{n+1}$  envolve inverter a matriz  $\mathbf{A}$  e multiplicá-la pela matriz-coluna  $\mathbf{d}^n$ :

$$[\mathbf{C}]^{n+1} = [\mathbf{A}]^{-1}[\mathbf{d}]^n \quad (3.77)$$

No entanto, devido ao fato de a matriz  $\mathbf{A}$  ser de banda tridiagonal, existem métodos mais eficientes computacionalmente para resolver este problema. O método de Thomas (ou TDMA) é um deles. Um algoritmo para este método é apresentado abaixo.

```
do i=1,N,1
    a(i) = a(i)/b(i-1)
    b(i) = b(i) - a(i)*c(i-1)
    d(i) = d(i) - a(i)*d(i-1)
end do
C(N)=d(N)/b(N)
do i=N-1,0,-1
    C(i)=(d(i)-c(i)*C(i+1))/b(i)
end do
```

### 3.4.1 Condições de Contorno

Existem três tipos de condições de contorno: a de Dirichlet, em que um valor é especificado para função no ponto; a de Neumann, em que um gradiente é dado na fronteira e a de Robin, uma combinação das duas primeiras (Fortuna, 2000). Neste trabalho, a única que será utilizada é a do tipo Neumann, pois o que se busca descrever neste caso são fluxos, mesmo que nulos eventualmente, (dados por gradientes) entre a água e a atmosfera e água e o fundo.

As condições de contorno serão diferentes para cada espécie modelada. Em geral, gases dissolvidos na água (OD, CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub>) terão um fluxo com a atmosfera e com o fundo. Já os solutos (Corg dissolvido, particulado e eventualmente outros) terão fluxo nulo com a atmosfera e dado pela sedimentação no fundo. As condições específicas para cada espécie foram dadas na respectiva sub-seção de 3.2, enquanto que abaixo são descritas as discretizações genéricas para cada tipo. Serão definidas condições de contorno usando-se a ideia do “ponto-fantasma”, ou

fictício, (Smith, 1965), conforme pode ser visto na figura 3.6:

1. Fluxo não-nulo com a atmosfera:

$$K_H \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{z=0}^n = k_{tr}(C_* - C_0^n) \quad (3.78)$$

$$K_H|_0^n \frac{C_{-1}^n - C_1^n}{2\Delta z} = k_{tr}(C_* - C_0^n)$$

$$C_{-1}^n = \frac{k_{tr}(C_* - C_0^n)2\Delta z}{K_H|_0^n} + C_1^n \quad (3.79)$$

em que  $k_{tr}$  é a velocidade de troca ( $\text{m s}^{-1}$ ) entre a espécie em questão e a atmosfera.  $C_*$  é a concentração de saturação ( $\text{mg m}^{-3}$ ) e  $K_H$  o coeficiente de difusão turbenta ( $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ ).

2. Fluxo nulo com a atmosfera:

$$K_H \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0 \quad (3.80)$$

$$K_H|_0^n \frac{C_{-1}^n - C_1^n}{2\Delta z} = 0$$

$$C_{-1}^n = C_1^n \quad (3.81)$$

3. Fluxo não-nulo com o fundo:

$$K_H \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{z=H} = k_{sed-tr}(C_{sed1}^n - C_N^n) \quad (3.82)$$

$$K_H|_N^n \frac{C_{N+1}^n - C_{N-1}^n}{2\Delta z} = k_{sed-tr}(C_{sed1}^n - C_N^n)$$

$$C_{N+1}^n = \frac{k_{sed-tr}(C_{sed1}^n - C_N^n)2\Delta z}{K_H|_N^n} + C_{N-1}^n \quad (3.83)$$

neste caso,  $k_{sed-tr}$  é uma velocidade de difusão entre a água e o sedimento ( $\text{m s}^{-1}$ ) e  $C_{sed1}$  a concentração da respectiva espécie na primeira camada de sedimento ( $\text{mg m}^{-3}$ ).

4. Fluxo (sedimentação) para o fundo:

$$K_H \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{z=H} = -v_{sed}C_N^n \quad (3.84)$$

$$K_H|_N^n \frac{C_{N+1}^n - C_{N-1}^n}{2\Delta z} = -v_{sed}C_N^n$$

$$C_{N+1}^n = -\frac{v_{sed}C_N^n 2\Delta z}{K_H|_N^n} + C_{N-1}^n \quad (3.85)$$

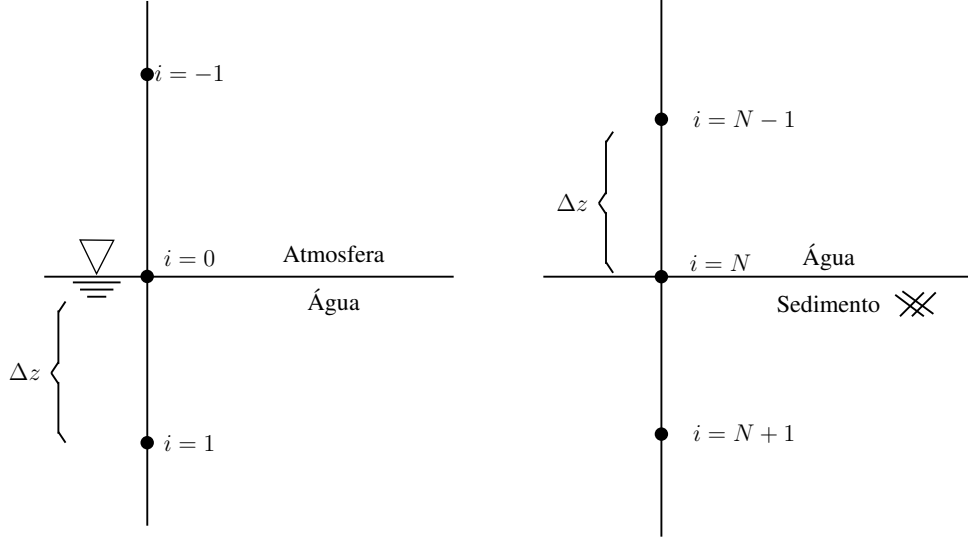


Figura 3.6: Condições de contorno na superfície (esquerda) e no fundo (direita), com emprego do “ponto-fantasma”, ou fictício.

Para que se feche o sistema de equações (3.76), deve-se aplicar as expressões (3.79) ou (3.81) na equação (3.67) quando  $i = 0$ . Da mesma forma para as expressões (3.83) ou (3.85) quando  $i = N$ . Abaixo, são demonstradas as expressões finais para as condições de contorno, quando feitas as referidas substituições na expressão (3.67).

1. Fluxo não-nulo com a atmosfera:

$$\begin{aligned}
C_0^{n+1} \left[ 1 + (f_1^{n+1} + 2f_0^{n+1} + f_{-1}^{n+1}) \alpha_0 s + \frac{\Delta t}{2} \frac{Q_{out}}{V} \Big|_i^{n+1} + \frac{2\Delta z k_{tr}}{K_H|_0^{n+1}} \alpha_0 s (f_{-1}^{n+1} + f_0^{n+1}) \right] + \\
C_1^{n+1} [-\alpha_0 s (f_{-1}^{n+1} + 2f_0^{n+1} + f_1^{n+1})] = \\
C_0^n \left[ 1 - (f_1^n + 2f_0^n + f_{-1}^n) \alpha_0 s - \frac{\Delta t}{2} \frac{Q_{out}}{V} \Big|_i^n - \frac{2\Delta z k_{tr}}{K_H|_0^n} \alpha_0 s (f_{-1}^n + f_0^n) \right] + \\
C_1^n [\alpha_0 s (f_{-1}^n + 2f_0^n + f_1^n)] + 2\Delta z k_{tr} \alpha_0 s \left[ \frac{C_*^{n+1}}{K_H|_0^{n+1}} (f_{-1}^{n+1} + f_0^{n+1}) + \frac{C_*^n}{K_H|_0^n} (f_{-1}^n + f_0^n) \right] + * \Delta t
\end{aligned} \tag{3.86}$$

2. Fluxo nulo com a atmosfera:

$$\begin{aligned}
C_0^{n+1} \left[ 1 + (f_1^{n+1} + 2f_0^{n+1} + f_{-1}^{n+1}) \alpha_0 s + \frac{\Delta t}{2} \frac{Q_{out}}{V} \Big|_i^{n+1} \right] + \\
C_1^{n+1} [-\alpha_0 s (f_{-1}^{n+1} + 2f_0^{n+1} + f_1^{n+1})] = \\
C_0^n \left[ 1 - (f_1^n + 2f_0^n + f_{-1}^n) \alpha_0 s - \frac{\Delta t}{2} \frac{Q_{out}}{V} \Big|_i^n \right] + \\
C_1^n [\alpha_0 s (f_{-1}^n + 2f_0^n + f_1^n)] + * \Delta t
\end{aligned} \tag{3.87}$$

3. Fluxo não-nulo com o fundo:

$$\begin{aligned}
& C_{N-1}^{m+1} [-\alpha_{NS} (f_{N-1}^{n+1} + 2f_N^{n+1} + f_{N+1}^{n+1})] + \\
C_N^{m+1} \left[ 1 + (f_{N+1}^{n+1} + 2f_N^{n+1} + f_{N-1}^{n+1}) \alpha_{NS} + \frac{\Delta t}{2} \frac{Q_{out}}{V} \Big|_i^{n+1} + \frac{2\Delta z k_{tr-sed}}{K_H|_N^{n+1}} \alpha_{NS} (f_N^{n+1} + f_{N+1}^{n+1}) \right] = \\
& C_{N-1}^n [\alpha_{NS} (f_{N-1}^n + 2f_N^n + f_{N+1}^n)] + \\
C_N^n \left[ 1 - (f_{N+1}^n + 2f_N^n + f_{N-1}^n) \alpha_{NS} - \frac{\Delta t}{2} \frac{Q_{out}}{V} \Big|_i^n - \frac{2\Delta z k_{tr-sed}}{K_H|_N^n} \alpha_{NS} (f_N^n + f_{N+1}^n) \right] \\
& + 2\Delta z k_{tr-sed} \alpha_{NS} \left[ \frac{C_{sed1}^{n+1}}{K_H|_N^{n+1}} (f_N^{n+1} + f_{N+1}^{n+1}) + \frac{C_{sed1}^n}{K_H|_N^n} (f_N^n + f_{N+1}^n) \right] + * \Delta t
\end{aligned} \tag{3.88}$$

4. Fluxo (sedimentação) para o fundo:

$$\begin{aligned}
& C_{N-1}^{m+1} [-\alpha_{NS} (f_{N-1}^{n+1} + 2f_N^{n+1} + f_{N+1}^{n+1})] + \\
C_N^{m+1} \left[ 1 + (f_{N+1}^{n+1} + 2f_N^{n+1} + f_{N-1}^{n+1}) \alpha_{NS} + \frac{\Delta t}{2} \frac{Q_{out}}{V} \Big|_i^{n+1} + \frac{2\Delta z v_{sed}}{K_H|_N^{n+1}} \alpha_{NS} (f_N^{n+1} + f_{N+1}^{n+1}) \right] = \\
& C_{N-1}^m [\alpha_{NS} (f_{N-1}^n + 2f_N^n + f_{N+1}^n)] + \\
C_N^n \left[ 1 - (f_{N+1}^n + 2f_N^n + f_{N-1}^n) \alpha_{NS} - \frac{\Delta t}{2} \frac{Q_{out}}{V} \Big|_i^n - \frac{2\Delta z v_{sed}}{K_H|_N^n} \alpha_{NS} (f_N^n + f_{N+1}^n) \right] + * \Delta t
\end{aligned} \tag{3.89}$$

# Capítulo 4

## Aplicações e Resultados

A fim de se testar o modelo para o ciclo do carbono e verificar as emissões de gases de efeito estufa, foi escolhido um reservatório em que houvesse algumas medidas de fluxos destes gases e os dados de entrada necessários para o modelo, ou seja, temperatura do ar, radiação incidente, velocidade do vento, umidade relativa, pressão atmosférica, vazões de entrada e saída e concentrações na água de carbono orgânico particulado (COP), dissolvido (COD), oxigênio dissolvido (OD), dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) e metano ( $\text{CH}_4$ ).

Um dos reservatórios escolhidos foi o de Funil (RJ), que cumpre as exigências acima prescritas. Outro reservatório simulado, apesar de não possuir medição de fluxos de GEE's, foi o do Rio Verde (PR). Este segundo está sendo utilizado para que se possa ter comparações de fluxos emitidos por dois lagos com dimensões distintas e localizados em regiões com climas significativamente diferentes. O detalhamento de cada um é dado nas seções a seguir.

### 4.1 Reservatório de Funil

O reservatório para estas comparações será o de Funil, localizado no município de Resende, estado do Rio de Janeiro, conforme pode ser visto na figura 4.1. O reservatório foi construído em 1969 com o barramento do rio Paraíba do Sul para fins hidrelétricos com capacidade instalada de 216 MW. Seu nível normal de operação está entre as cotas máxima de 467 m, acima do nível do mar, e mínima de 444,0 m, com área inundada de aproximadamente 40 km<sup>2</sup> (Furnas, 2016).

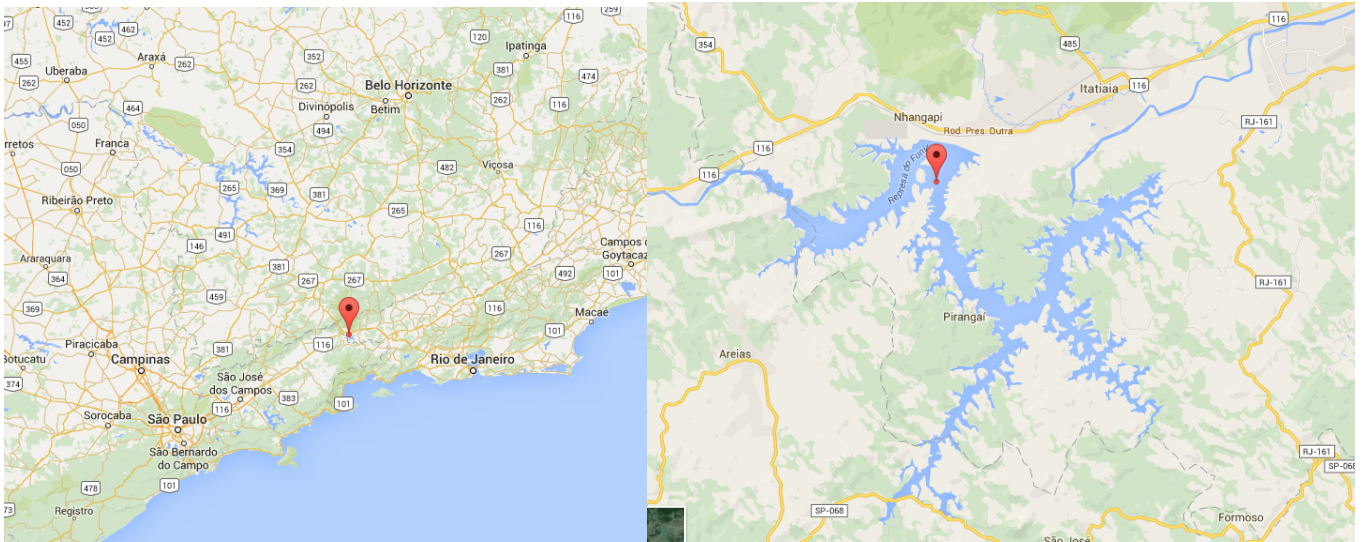


Figura 4.1: Localização do reservatório de Funil, Estado do Rio de Janeiro. Fonte: Google Maps.

Os dados utilizados para este trabalho foram obtidos no escopo do projeto BALCAR — Emissões de Gases de Efeito Estufa em Reservatórios de Centrais Hidrelétricas — cujo objetivo foi quantificar a emissão de GEE's pelos principais reservatórios hidrelétricos brasileiros, através de medições de fluxo de  $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$ , nas superfícies dos lagos, entre outras atividades (Brasil, 2014).

O conjunto de dados foi dividido em três partes:

1. dados para calibração do modelo de temperatura;
2. dados de entrada, utilizados como forçantes no modelo; e
3. dados de fluxo medidos, para comparação com o modelo.

O primeiro e o segundo conjunto de dados poderiam ser o mesmo, no entanto, como veremos a seguir, os dados do período escolhido para execução do modelo possuem grandes falhas nas temperaturas na coluna da água, o que torna as comparações muito deficientes. O segundo e o terceiro conjunto de dados são coincidentes no período de tempo.

### 4.1.1 Calibração do modelo de temperatura

Como foi comentado, e também visto no apêndice A, o modelo de temperatura requer o ajuste de 3 parâmetros que dependem do reservatório modelado, a fim de se compatibilizar os perfis de temperatura simulados com os medidos em campo, especialmente no que diz respeito à profundidade da termoclina. Desta forma, são feitas simulações com as variáveis de entrada para o modelo de temperatura (temperatura do ar, radiação incidente, velocidade do vento e umidade relativa) para o período e verificados os perfis. Caso os resultados não sejam coincidentes, ajusta-se manualmente os parâmetros  $\sigma_1$ ,  $c_1$  e  $p$  — equações (A.6) e (A.7) — até que se obtenham perfis próximos. Com estes três parâmetros calibrados, pode-se utilizar o modelo para simular outros períodos, pois entende-se que as características do reservatório não devem se alterar.

O período de simulação para obtenção dos fluxos e comparações está compreendido entre os dias 01/06/2011 a 31/05/2012. No entanto, como podemos ver na figura 4.2, este período apresenta muitas falhas e inconsistências para todas as profundidades em que foram medidas as temperaturas da água.

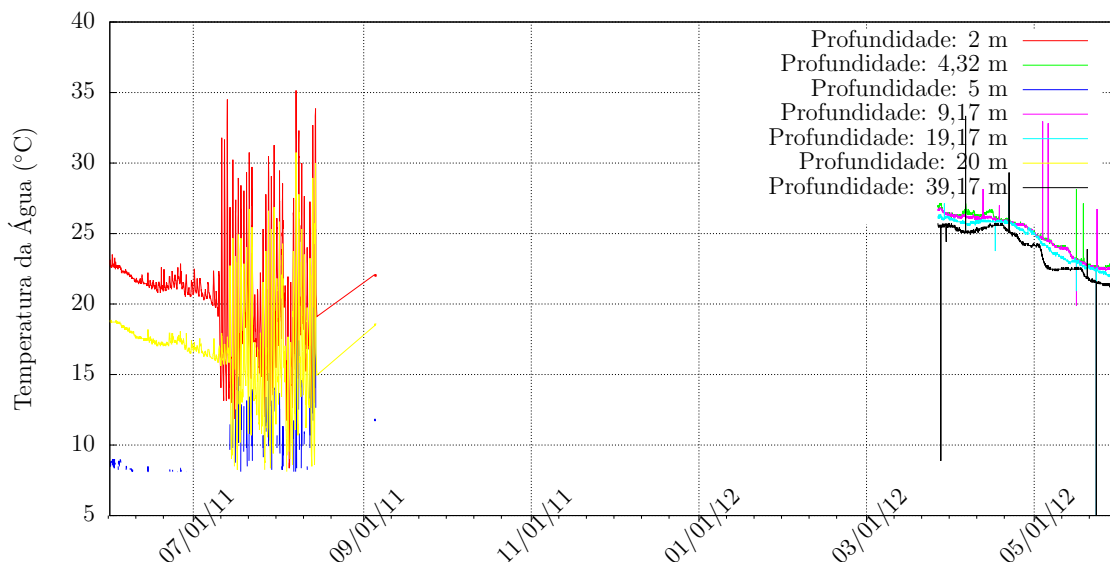


Figura 4.2: Temperatura na água medida em várias profundidades no período de 01/06/2011 a 31/05/2012, para o reservatório de Funil.

Assim, foi escolhido outro período que possuísse maior quantidade de dados e que fossem mais contínuos e sem falhas. Na figura 4.3 pode-se visualizar a temperatura da água nas

profundidades de 4,32, 9,17, 19,17 e 39,17 metros, no período de 01/04/2012 a 31/12/2013. Para executar o modelo a fim de se gerar os perfis de temperatura na água, é necessário que se conheça as variáveis meteorológicas (temperatura do ar, radiação incidente, velocidade do vento e umidade relativa) no mesmo período.

Os dados meteorológicos possuem falhas, devido a interrupções de mediação em certos períodos, que precisam ser preenchidas. A forma de preenchimento foi essencialmente o uso de interpolação linear entre dois períodos sem falhas. Isto se mostrou possível já que os períodos de falhas contínuas não foram demasiadamente longos. Os dados originais e corrigidos para estas variáveis podem ser vistos na figura 4.4. A porcentagem de falhas nos dados é de 26,84% do período, para cada variável, já que as falhas ocorreram simultaneamente.



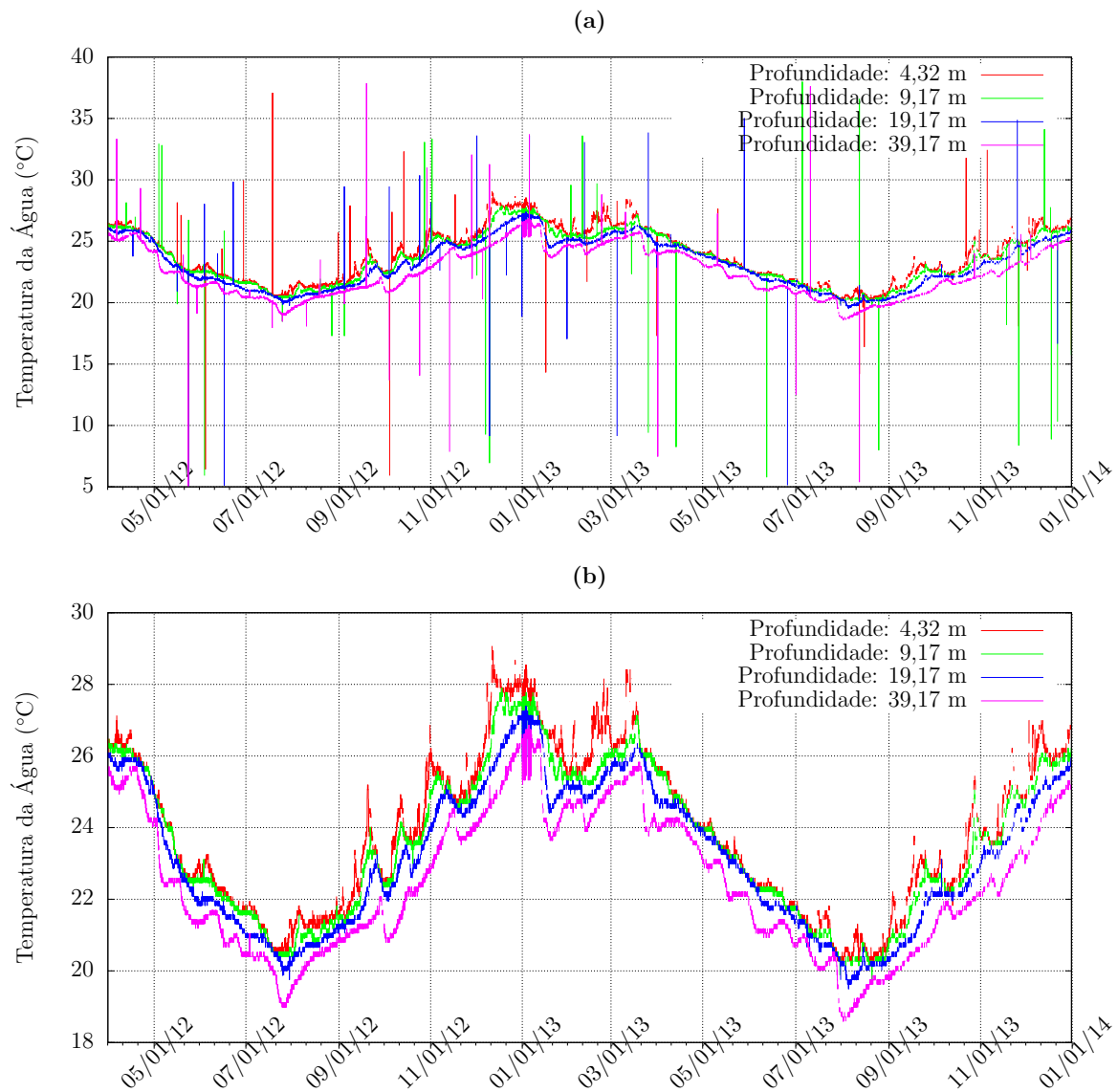


Figura 4.3: Temperatura na água medida em várias profundidades no período de 01/04/2012 a 31/12/2013, no reservatório de Funil. (a) dados originais e (b) dados após retiradas dos picos inconsistentes (*spikes*).

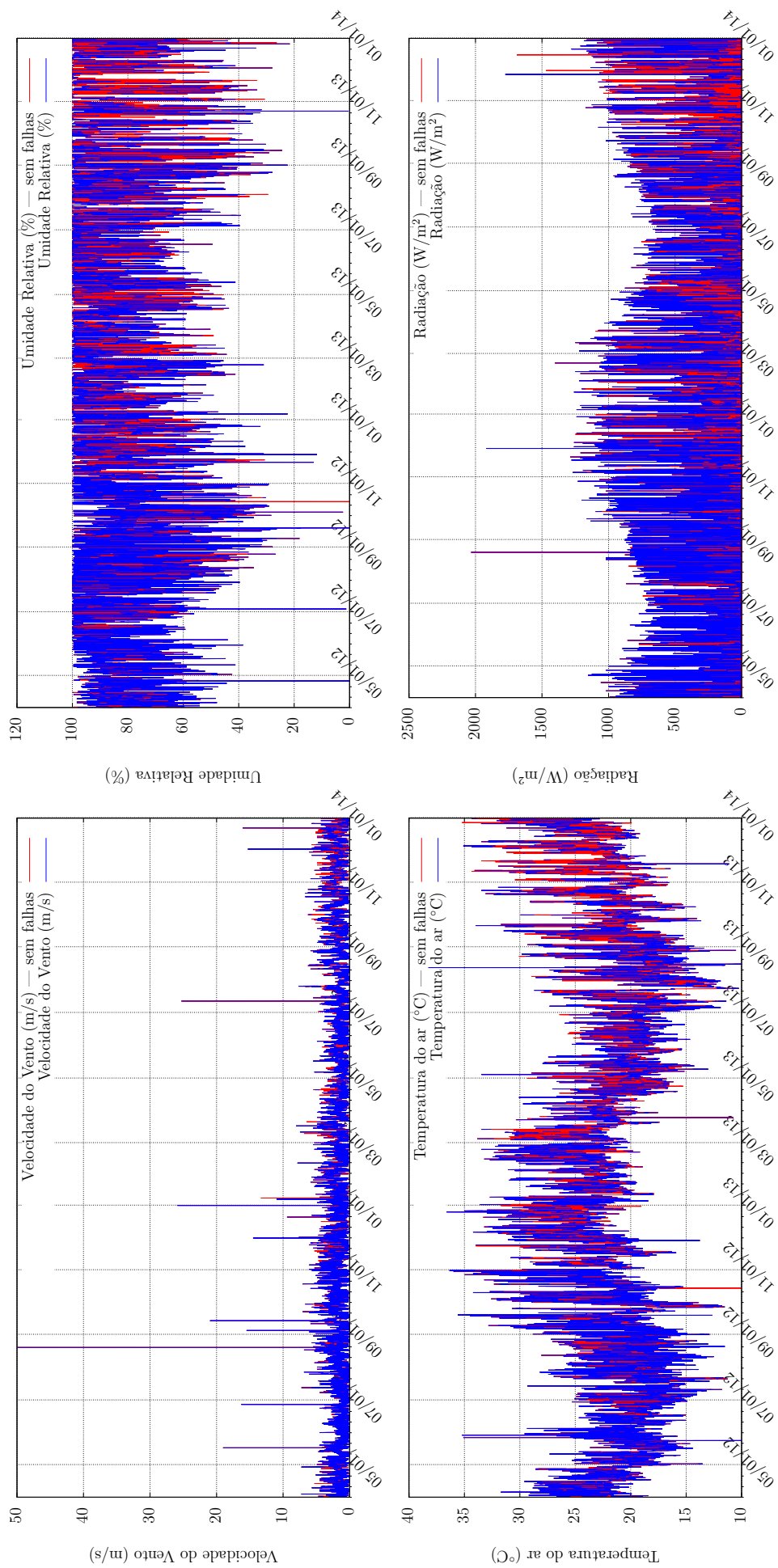


Figura 4.4: Variáveis meteorológicas utilizadas como forçantes para calibração do modelo de temperatura no período de 01/04/2012 a 31/12/2013. As linhas azuis representam os dados originais, enquanto as linhas vermelhas compreendem as falhas preenchidas pela interpolação linear.

Com os dados em mãos, é realizada a primeira simulação com quaisquer valores de  $\sigma_1$ ,  $c_1$  e  $p$  e verificado se houve acerto pelo modelo. Em caso negativo, ajusta-se estes parâmetros até que se tenha um resultado satisfatório. A figura 4.6 mostra o gráfico das temperaturas simuladas e medidas ao longo do tempo após a calibração manual. A figura 4.7 mostra os perfis de temperatura simulados e medidos ao longo da profundidade para algumas datas do período e a figura 4.8 mostra a correlação entre os dados simulados e medidos para cada profundidade conhecida no momento em que os parâmetros corretos foram ajustados. O conjunto de parâmetros ajustados foi  $\sigma_1 = 0,7 \times 10^{-6}$ ,  $c_1 = 2,82 \times 10^{-2}$  e  $p = 1$ , utilizando-se  $\Delta t = 100$  s,  $\Delta x = 1$  m e médias móveis com janelas de 10 dias.

É importante ressaltar que estão disponíveis apenas os dados de cota/área para os níveis de operação do reservatório, ou seja, entre as cotas 444,0 e 467,0 metros. Para que fosse possível simular o reservatório até o fundo foi feita uma extrapolação linear da cota 444,0 a 387,0 m — coroamento da barragem (Furnas, 2016) — considerando a área neste ponto igual a zero, e então obtido um ajuste polinomial entre as cotas mínima e máxima. O gráfico com estes pontos e o polinômio pode ser visto na figura 4.5.

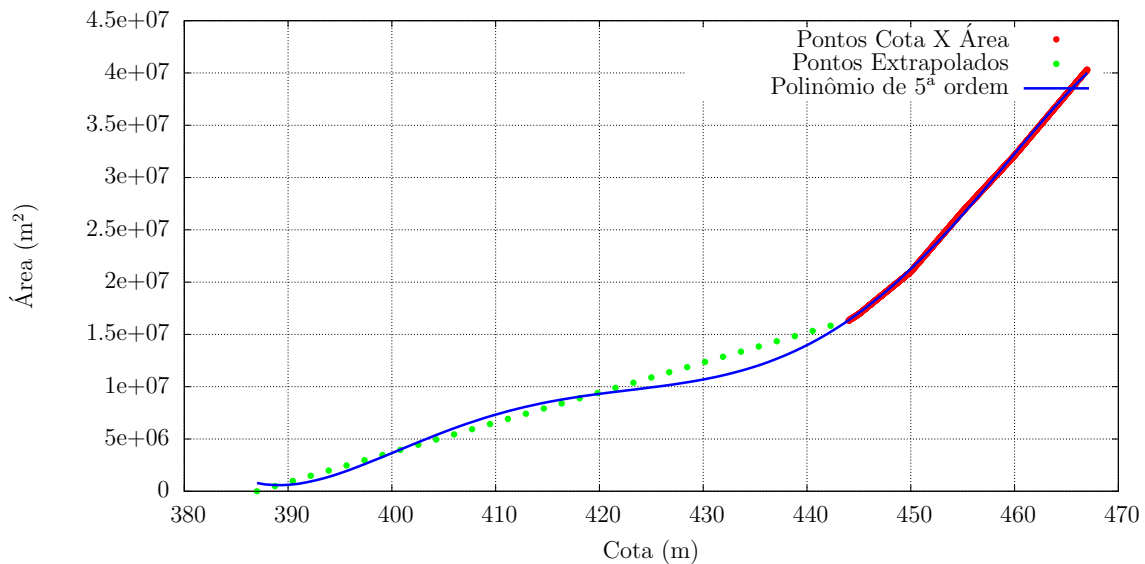


Figura 4.5: Curva cota/área, pontos extrapolados e polinômio ajustado para o reservatório de Funil.

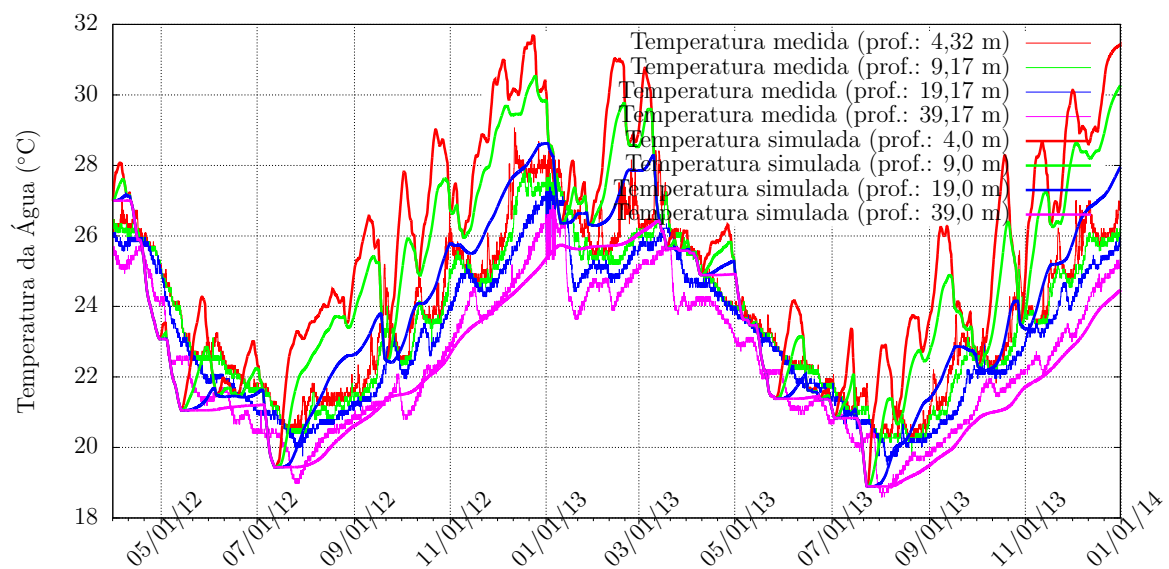


Figura 4.6: Temperatura na água medida e simulada em várias profundidades no período de 01/04/2012 a 31/12/2013, utilizando os melhores parâmetros de calibração possíveis.

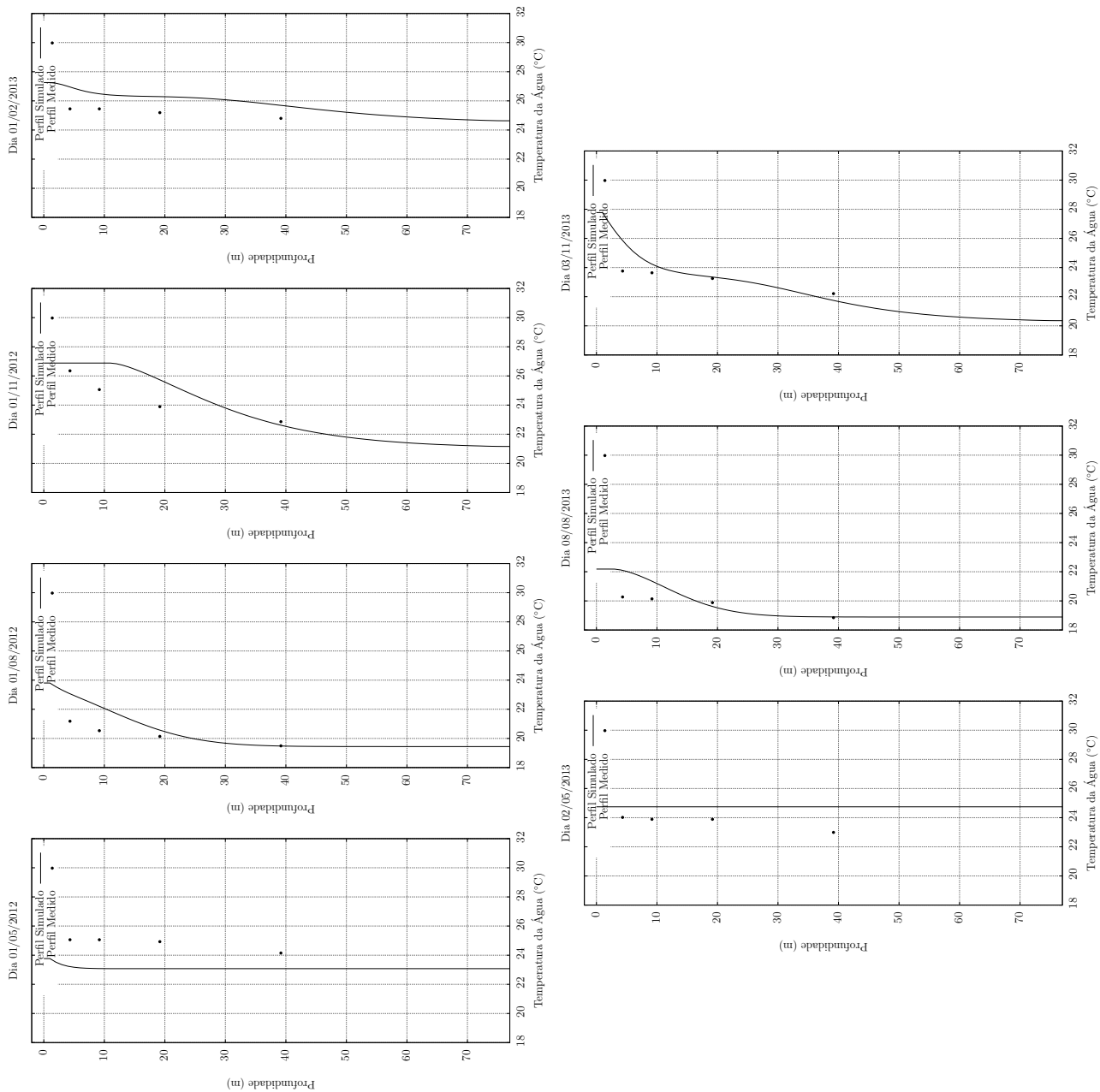


Figura 4.7: Perfis de temperatura na água medida e simulada para algumas datas no período de 01/04/2012 a 31/12/2013, utilizando os melhores parâmetros de calibração possíveis.

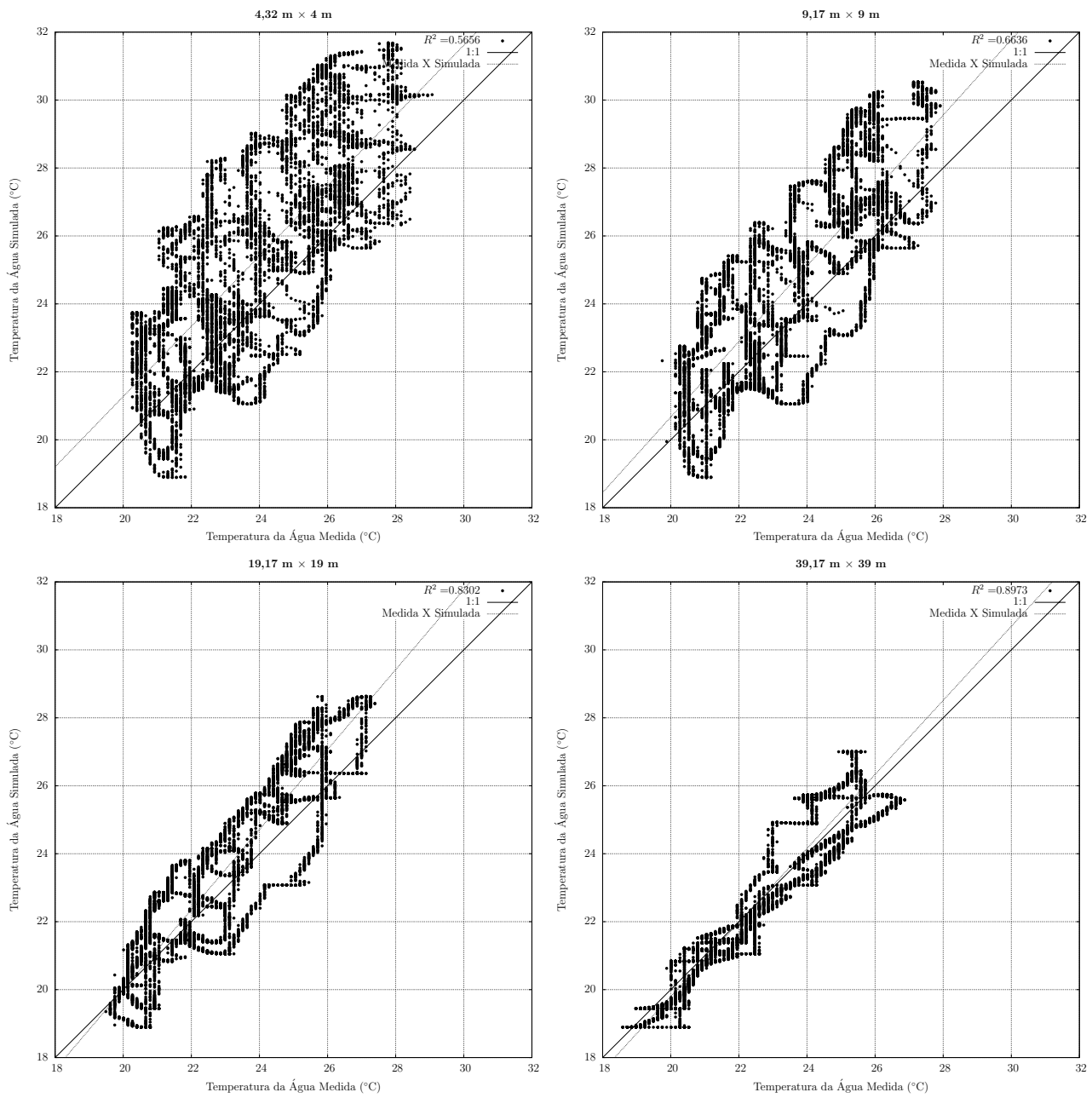


Figura 4.8: Correlações para as temperatura na água medida e simulada nas profundidades  $4,32 \times 4$ ,  $9,17 \times 9$ ,  $19,17 \times 19$  e  $39,17 \times 39 \text{ m}$  no período de 01/04/2012 a 31/12/2013, utilizando os melhores parâmetros de calibração possíveis.

## 4.1.2 Preparação dos dados de entrada para simulações de fluxo de GEE's

Como foi dito, os dados para as simulações compreendem o período de 01/06/2011 a 31/05/2012, pois foi neste intervalo que ocorreram as campanhas de medição de fluxos de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub>. Antes de falarmos dos fluxos é necessário se fazer alguns comentários a respeito dos dados de entrada (forçantes do modelo). Estes dados podem ser divididos em:

1. Dados meteorológicos: para obtenção dos perfis de temperatura da água. Além disso a velocidade do vento, radiação e pressão atmosférica estão associadas a alguns parâmetros do modelo biogeoquímico.
2. Dados hidrológicos: as vazões de entrada e saída do reservatório inserem e retiram concentrações de todas as espécies modeladas e variam o nível do reservatório, modificando a área superficial, fator importante nos aspectos relacionados à emissão de GEE's e absorção de energia.
3. Dados biogeoquímicos: concentrações de entrada (acompanhando a vazão afluente).
4. Dados de fluxos: emissão ou absorção de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> para comparação com os valores obtidos no modelo.

Os dados meteorológicos foram tratados de forma semelhante aos dados utilizados na calibração do modelo, quando ocorriam falhas pontuais, ou durante curtos períodos. No entanto, como pode ser visto na figura 4.9, existe um grande período sem dados entre os dias 15/08/2011 a 24/10/2011. Este período foi preenchido utilizando-se médias do período histórico (anos de 2007 a 2010 e 2013) para o respectivo dado, coincidindo-se os dias, meses e horários. Novamente, os períodos de falha nos dados ocorrem ao mesmo tempo, e a porcentagem de dados faltantes corresponde a 32,71% do total do período. A pressão atmosférica foi a única variável em que se utilizou a correção para o período todo, pois possuía inconsistências na maior parte de sua medição e para o dado de velocidade do vento foi utilizada a média do período histórico até o dia 14/02/2012.

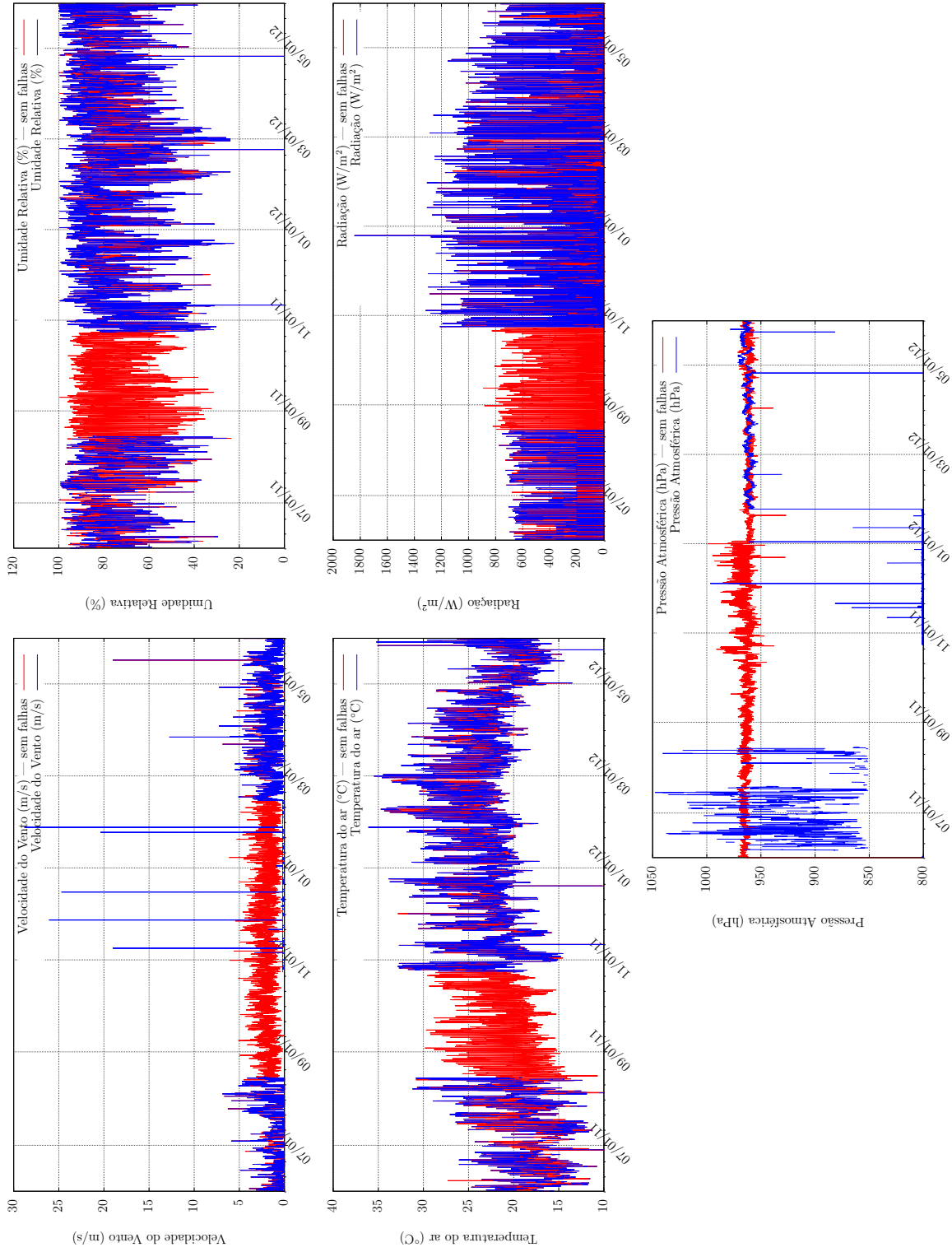


Figura 4.9: Variáveis meteorológicas utilizadas como forçantes para as simulações no período de 01/06/2011 a 31/05/2012. As linhas azuis representam os dados originais, enquanto as linhas vermelhas compreendem as falhas preenchidas.



Com relação aos dados hidrológicos, foram obtidas as vazões afluentes medidas no rio Paraíba do Sul, à montante e a vazão defluente. Este reservatório possui controle de vazão nas comportas, o que pode resultar em vazões de saída diferentes das de entrada, causando variação no nível do reservatório. No entanto, para estas simulações (e para a calibração do modelo de temperatura) foi considerada uma única cota média, já que a variação no período não foi superior a 1,81 m em torno deste valor, o que representa menos de 2,5% da profundidade total média do reservatório. No entanto, entende-se a importância de se avaliar os fluxos de gases e o balanço e energia no reservatório com as cotas variando. Na figura 4.10 pode-se visualizar a variação das vazões ao longo do período da simulação (para que a cota se mantenha constante, forçou-se que as vazões de saída fossem iguais às de entrada).

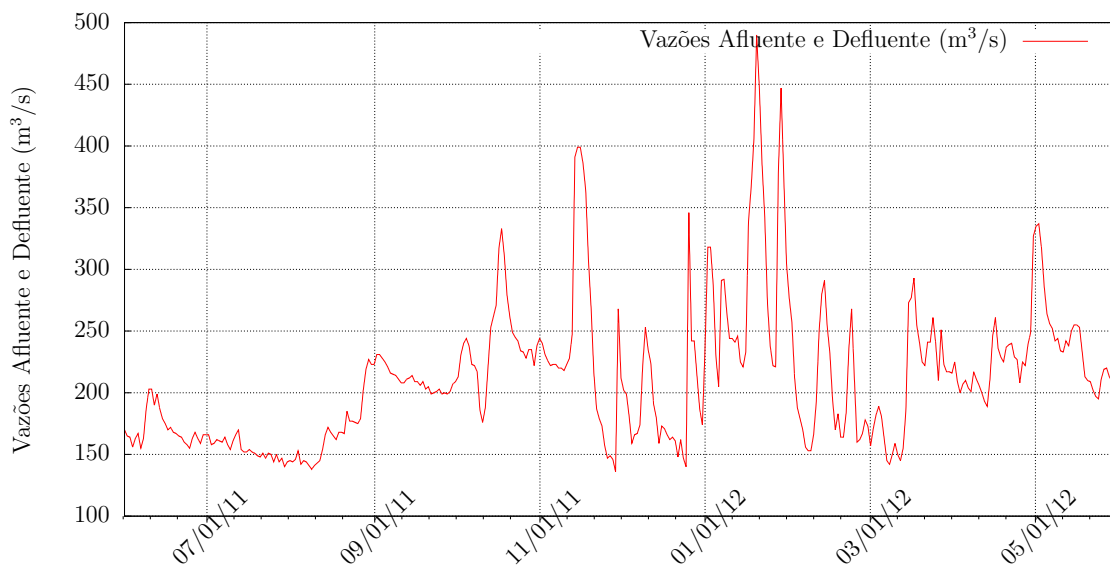


Figura 4.10: Vazão afluente e defluente no reservatório no período de 01/06/2011 a 31/05/2012.

Os dados biogeoquímicos, ou seja, as concentrações de OD, COP, COD, CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> foram medidos em quatro campanhas (01/08/2011, 19/10/2011, 29/02/2012 e 23/05/2012), a montante do reservatório (ponto FL10), dois a jusante (FLJ01 e FLJ02) e em 10 pontos ao longo do lago. A localização dos pontos pode ser vista na figura 4.11. Para as concentrações de interesse que forcem o modelo (FL10) foi utilizado uma interpolação linear entre as campanhas para dar continuidade aos dados. O dado da primeira campanha foi repetido para o primeiro dia de simulação e a condição inicial no reservatório foi dado pela média das concentrações dos 10 pontos no reservatório (dividida igualmente ao longo da coluna d'água). Estas concentrações podem ser vistas na figura 4.12.

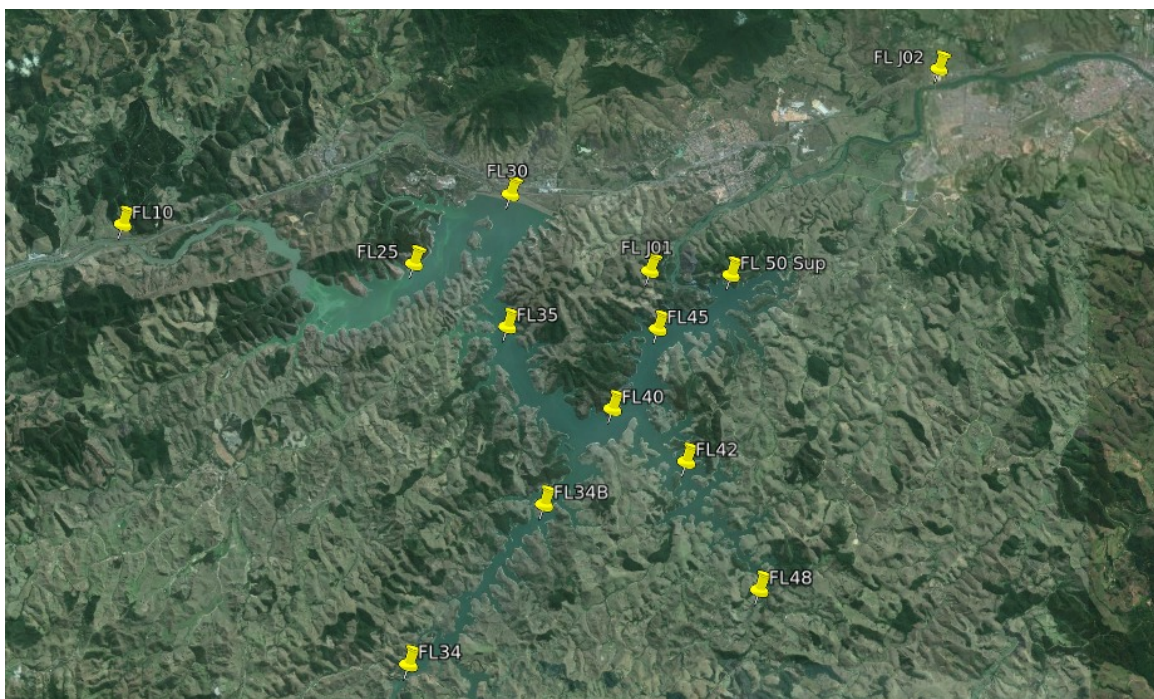


Figura 4.11: Pontos de coleta das campanhas no reservatório de Funil.

Os fluxos foram medidos em algumas datas dentro deste período de 01/06/2011 a 31/05/2012. Os valores podem ser vistos na figura 4.13 em que estão presentes as medições de fluxos da água para a atmosfera ( $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$ ), difusivos do sedimento para a coluna d'água ( $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$ ) e ebulitivo do sedimento para a coluna d'água ( $\text{CH}_4$ ). Todas estas campanhas, para cada dia, compreenderam diversos pontos no reservatório; portanto, o valor mostrado é a média dos mesmos.

### 4.1.3 Simulações

Com os parâmetros satisfatoriamente ajustados, foi realizada a simulação considerando, agora, as concentrações de interesse deste modelo para o período de 01/06/2011 a 31/05/2012. Note-se que os parâmetros (taxas e velocidades de decaimento e sedimentação, entre outros) não foram calibrados neste modelo, mas retirados da literatura, conforme pode ser visto na tabela 4.1. A condição inicial para as concentrações na água, como foi dito anteriormente, é dada pela média das concentrações dos 10 pontos medidos no reservatório (definida como sendo igual para todas as profundidades da coluna d'água) no primeiro dia. A condição inicial para as concentrações no sedimento foi dada pelos mesmos valores da água.

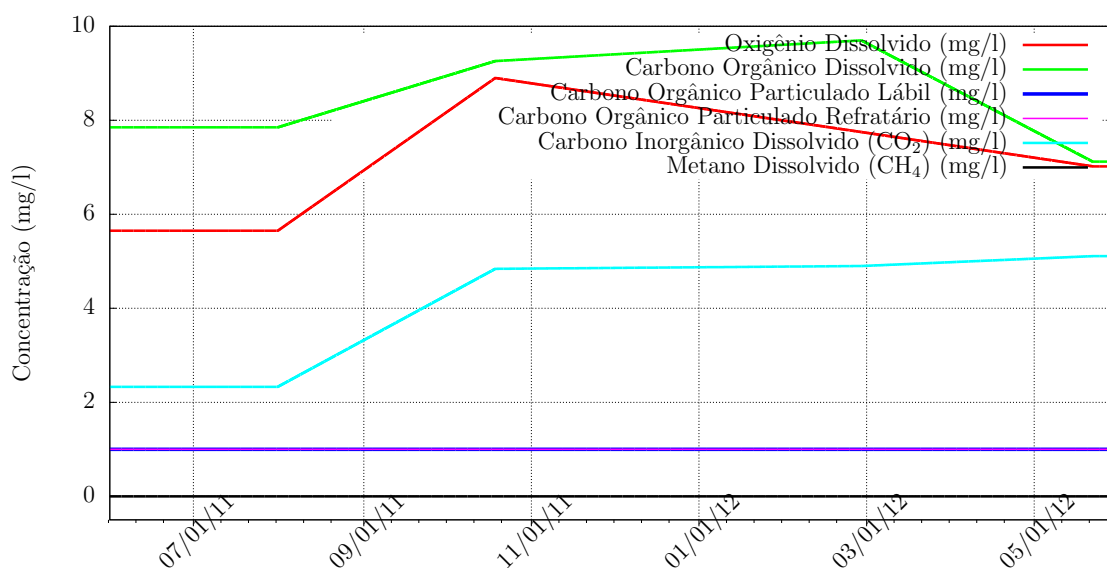


Figura 4.12: Concentrações na entrada do reservatório (FL10) no período de 01/06/2011 a 31/05/2012.

Na figura 4.14 estão os perfis de temperatura e das concentrações do ciclo de carbono simuladas para algumas datas do período e suas médias na profundidade, ao longo do tempo, estão na figura 4.16. As concentrações nos sedimentos aeróbio e anaeróbio podem ser vistas na figura 4.15. Os fluxos simulados de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub>, da água para a atmosfera e do sedimento para a água, estão na figura 4.17. As comparações entre os fluxos simulados e medidos estão nas figuras 4.18 e 4.19, respectivamente, para CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub>.

Com relação às concentrações médias ao longo do tempo nota-se que todos os compostos não apresentaram muita variação, exceto pelo oxigênio dissolvido que aumentou após alguns meses de simulação. As concentrações médias de metano apresentam comportamento inverso ao do OD, o que era de se esperar, pois o primeiro é formado na ausência do segundo. Neste período sempre ocorreu a formação de metano, pois apesar de as concentrações de OD não serem nulas na média, nota-se que para grandes profundidades o efeito de anoxia acontece, como podemos visualizar nos perfis de concentração.

Observando-se os perfis de concentração e temperatura, nota-se que este reservatório é pouco estratificado (apesar de muito profundo). Na verdade, pouco se pode afirmar sobre esta situação já que não existem temperaturas medidas a profundidades maiores e este resultado depende dos parâmetros calibrados para estes dados disponíveis. As concentrações, portanto, variam pouco ao longo da coluna d'água, sendo maiores para COP, já que ali existe troca com o

sedimento, além da sedimentação acumular maior quantidade de compostos nesta região. O metano apresentou um comportamento já esperado, com maiores concentrações próximas ao sedimento e nulo (ou quase nulo) próximo à superfície, onde se observa maiores concentrações de OD, responsável pelo seu consumo. Os perfis de oxigênio dissolvido estão fortemente ligados à grande profundidade do reservatório já que a principal fonte deste gás é a superfície. Em profundidades maiores sua concentração é nula, permitindo inclusive a formação de metano nestas regiões.

Os fluxos de  $\text{CO}_2$  não variaram muito ao longo do tempo, estando bem relacionados às concentrações deste gás na água, que também não variaram muito. Existe uma queda brusca nas emissões, no começo da simulação, possivelmente relacionada às baixas velocidades do vento no período, como pode ser visto na figura 4.9. Os fluxos de metano apresentaram um comportamento semelhante, ou seja, com fluxos altamente relacionados à sua concentração na água e à velocidade do vento. Após a metade da simulação, nota-se que os fluxos de  $\text{CH}_4$  foram nulos, pois apesar deste ainda estar presente em profundidades maiores, ele não escapa para a atmosfera devido ao consumo pelo oxigênio dissolvido na oxiclina. Este fato, inclusive, nos permite fazer uma discussão interessante em relação ao consumo de metano, pois o modelo conseguiu reproduzir o comportamento observado por Carini et al. (2005) e Bastviken et al. (2002), relacionado ao alto consumo de metano pelas bactérias metanotróficas próximo à oxiclina. Na figura 4.30 é possível observar este comportamento obtido pelo modelo em vários períodos da simulação e na figura 4.21 está uma representação de um dos perfis observados pelos autores citados. É importante ressaltar que os valores medidos são para outro reservatório e a ideia aqui é apenas demonstrar que o modelo foi capaz de reproduzir este comportamento.

Nota-se que os fluxos simulados de  $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$  não estiveram tão próximos aos resultados esperados (medidos em campo), mesmo com resultados coerentes nas concentrações dos compostos. Para o  $\text{CO}_2$ , apenas em alguns períodos os resultados foram um pouco mais próximos, especialmente no mês de outubro de 2011. A emissão de  $\text{CH}_4$  do sedimento para a água acertou alguns valores (agosto e novembro de 2011), mas não em outros, diferentemente do  $\text{CO}_2$  que esteve muito mal relacionado, apresentando sempre um fluxo negativo (da água para o sedimento) apesar de ter apresentado alguns valores próximos em alguns períodos (novembro de 2011). Isto mostra que é necessário um melhor equacionamento para este composto no

sedimento e para os dois na interface água-ar. É importante ressaltar que em nenhum momento o modelo apresentou fluxos ebulitivos de metano. A falta de assertividade do modelo pode ser dada por vários fatores, entre eles a ausência de calibração dos parâmetros de qualidade da água ou possíveis erros de medição das concentrações e dos fluxos.

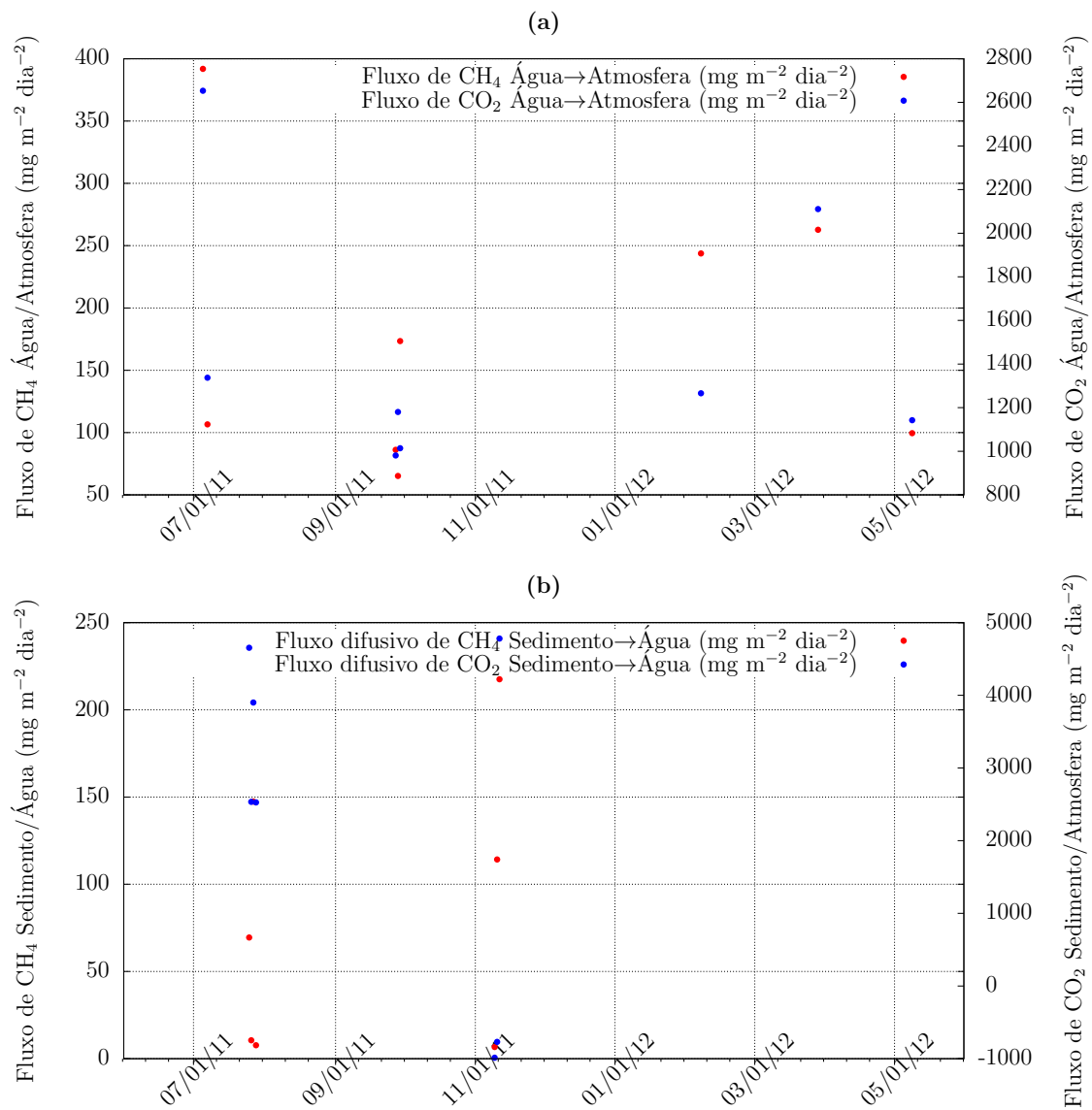


Figura 4.13: Fluxos de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> medidos no período de 01/06/2011 a 31/05/2012. **(a)**: fluxo entre a superfície da água e a atmosfera e **(b)**: fluxo difusivo entre o sedimento e a coluna d'água

Tabela 4.1: Valores típicos para os parâmetros, constantes e coeficientes nas equações da água e do sedimento. Os nomes podem ser consultados na Lista de Símbolos.

Símbolo	Unidade	Valores usuais	Valor utilizado	Referência
$D_{P1,20}$	dia <sup>-1</sup>	0,005 a 0,8	0,2	Bowie et al. (1985)
$D_{P2}$	dia <sup>-1</sup>	0,003 a 0,17	0,1	Bowie et al. (1985)
$D_Z$	dia <sup>-1</sup>	0,5 a 5,0	0,0	Chapra (1997)
$f_{bs}$	1	–	0,5	–
$f_{bL}$	1	0,01 a 0,99	0,423	Sharifi et al. (2013)
$f_{bR}$	1	0,04 a 0,99	0,421	Sharifi et al. (2013)
$f_{bD}$	1	0,01 a 0,33	0,158	Sharifi et al. (2013)
$G_{20}$	dia <sup>-1</sup>	0,2 a 8,0	2,0	Bowie et al. (1985)
$k_{db}$	dia <sup>-1</sup>	–	$D_P$	–
$k_{d1,20}$	dia <sup>-1</sup>	0,01 a 1,5	0,2	Bowie et al. (1985)
$k_{hid_2}$	dia <sup>-1</sup>	$1,0 \times 10^{-6}$ a $1,0 \times 10^{-4}$	$1,35 \times 10^{-5}$	Sharifi et al. (2013)
$k_{hid_3}$	dia <sup>-1</sup>	$1,0 \times 10^{-7}$ a $1,0 \times 10^{-5}$	$1,27 \times 10^{-6}$	Sharifi et al. (2013)
$k_{lix_2}$	dia <sup>-1</sup>	–	$1,35 \times 10^{-5}$	–
$k_{lix_3}$	dia <sup>-1</sup>	–	$1,27 \times 10^{-6}$	–
$k_{M20}$	dia <sup>-1</sup>	0,101 a 0,283	0,283	Utsumi et al. (1998)
$k_{M1,20}$	dia <sup>-1</sup>	–	$k_{d1,2}$	–
$K_{Hd}$	mg m <sup>-3</sup>	–	0,5	Bowie et al. (1985)
$K_{HM}$	mg m <sup>-3</sup>	–	0,5	Bowie et al. (1985)
$l_1$	m	–	0,001	Chapra et al. (2008)
$l_2$	m	–	0,1	Chapra et al. (2008)
$r_{ca}$	mgC mgcla <sup>-1</sup>	10 a 100	10,0	Bowie et al. (1985)
$r_{oc}$	mgO <sub>2</sub> mgC <sup>-1</sup>	2,67	2,67	Chapra (1997)
$r_{on}$	mgO <sub>2</sub> mgN <sup>-1</sup>	4,47	4,47	Chapra et al. (2008)
$v_b$	m dia <sup>-1</sup>	–	$6,85 \times 10^{-6}$	di Toro (2001)
$v_{sed}$	m dia <sup>-1</sup>	–	0,01H	Chapra et al. (2008)
$\beta_{D1}, \beta_{D2}$	m dia <sup>-1</sup>	0,0085 a 1,0902	0,2787	Sharifi et al. (2013)
$\beta_{M1}, \beta_{M2}$	m dia <sup>-1</sup>	0,0092 a 1,3157	0,2787	Sharifi et al. (2013)
$\theta_G$	1	1,01 a 1,2	1,066	Bowie et al. (1985)
$\theta_{DP1}$	1	1,08	1,08	Chapra (1997)

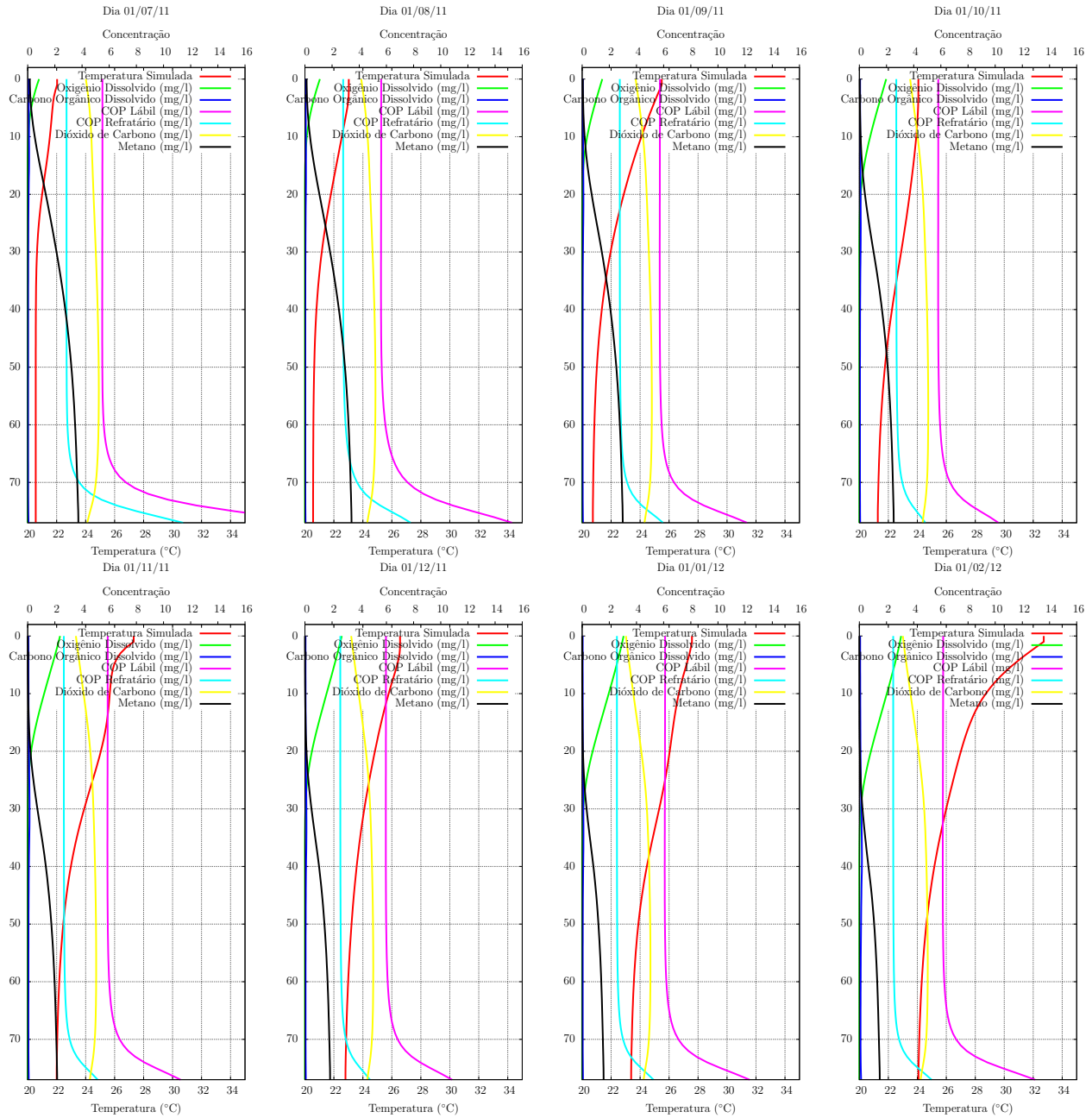


Figura 4.14: Perfis de temperatura e concentrações de oxigênio dissolvido, carbono orgânico particulado lábil e refratário, carbono orgânico dissolvido,  $\text{CO}_2$  dissolvido e  $\text{CH}_4$  dissolvido simulados para o período de 01/06/2011 a 31/05/2012 no reservatório de Funil.



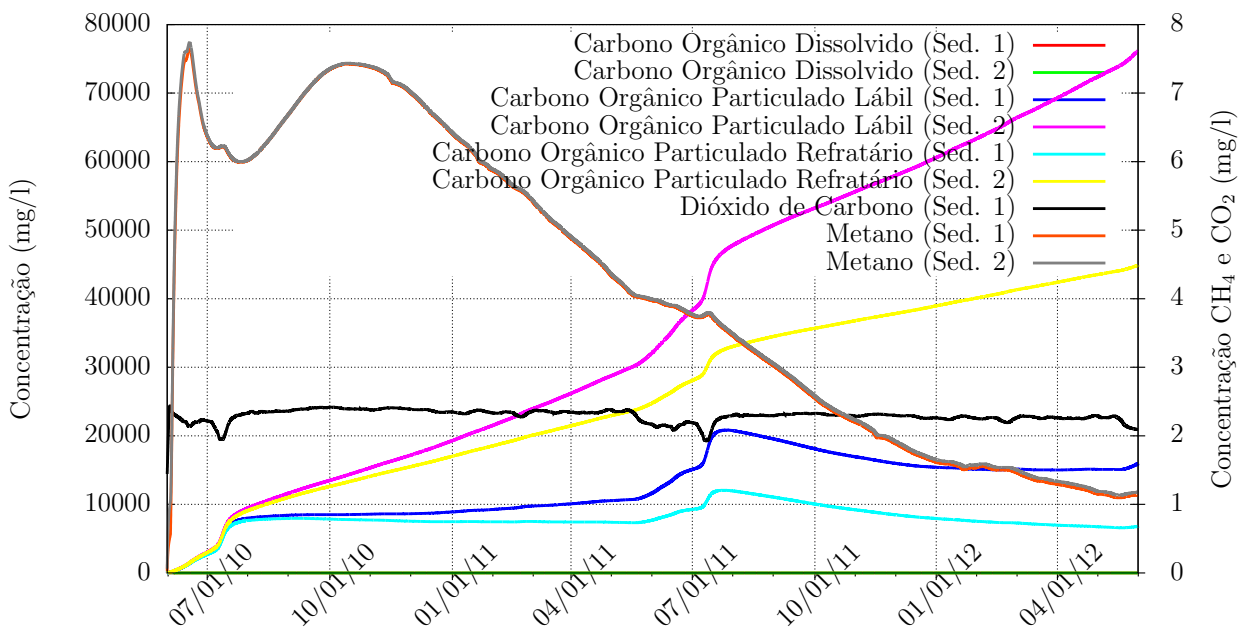


Figura 4.15: Concentrações simuladas de COD, COP lábil e refratário, CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> dissolvidos nos sedimento aeróbio (Sed. 1) e anaeróbio (Sed. 2) para o reservatório de Funil.

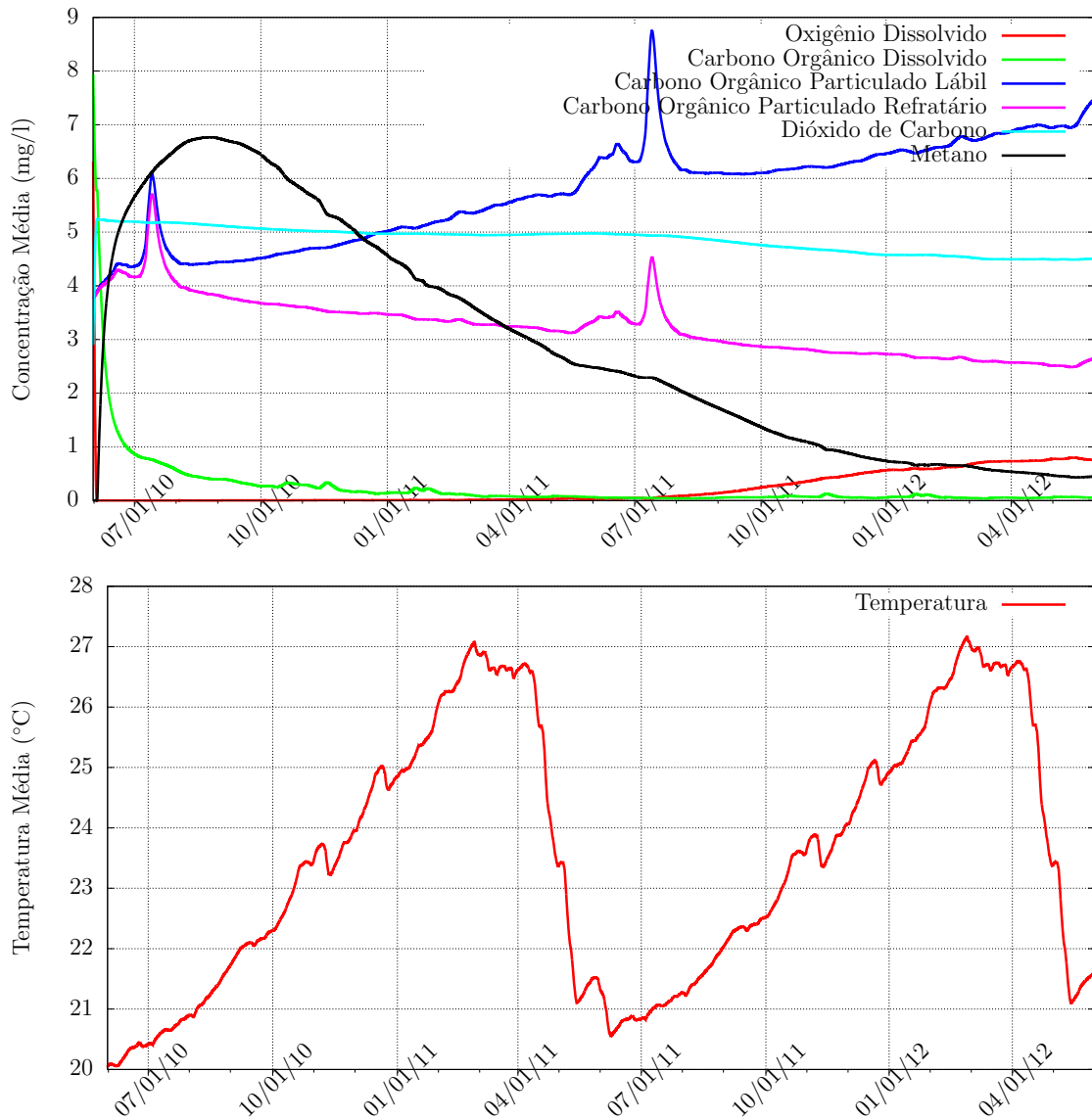


Figura 4.16: Temperatura e concentrações médias simuladas na água de OD, COD, COP lábil e refratário, CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> para o reservatório de Funil.

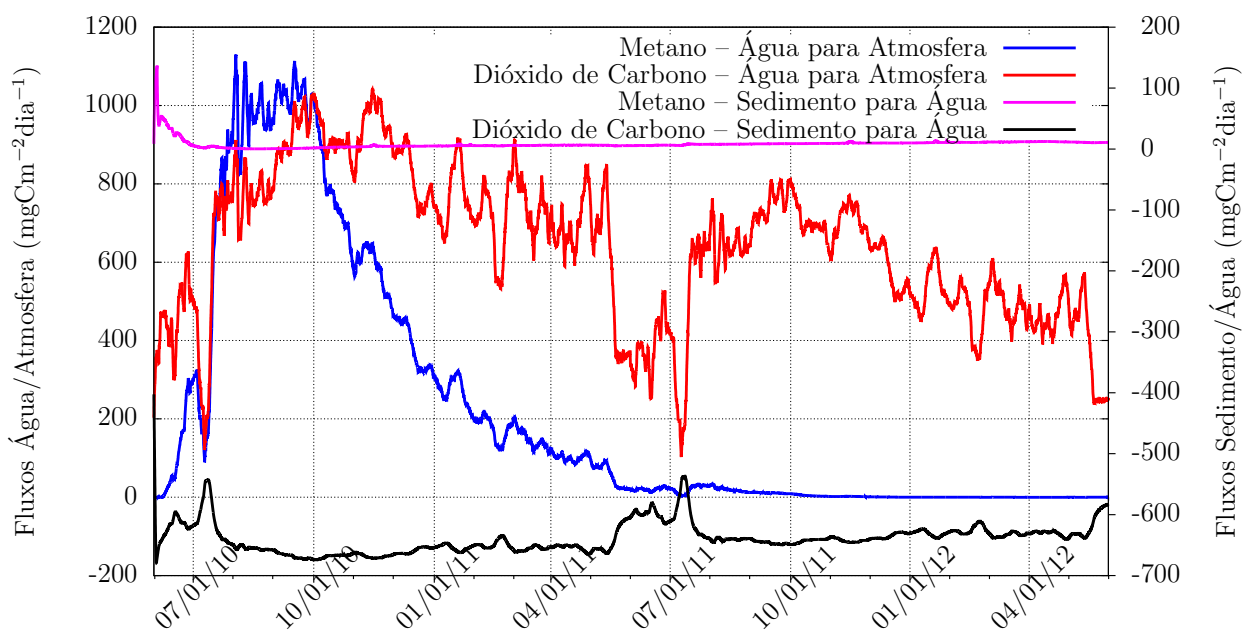


Figura 4.17: Fluxos de  $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$  da água para a atmosfera e do sedimento para a água para o reservatório de Funil. Quando os fluxos são positivos, estes são da água para a atmosfera ou do sedimento para água, caso contrário, são negativos.

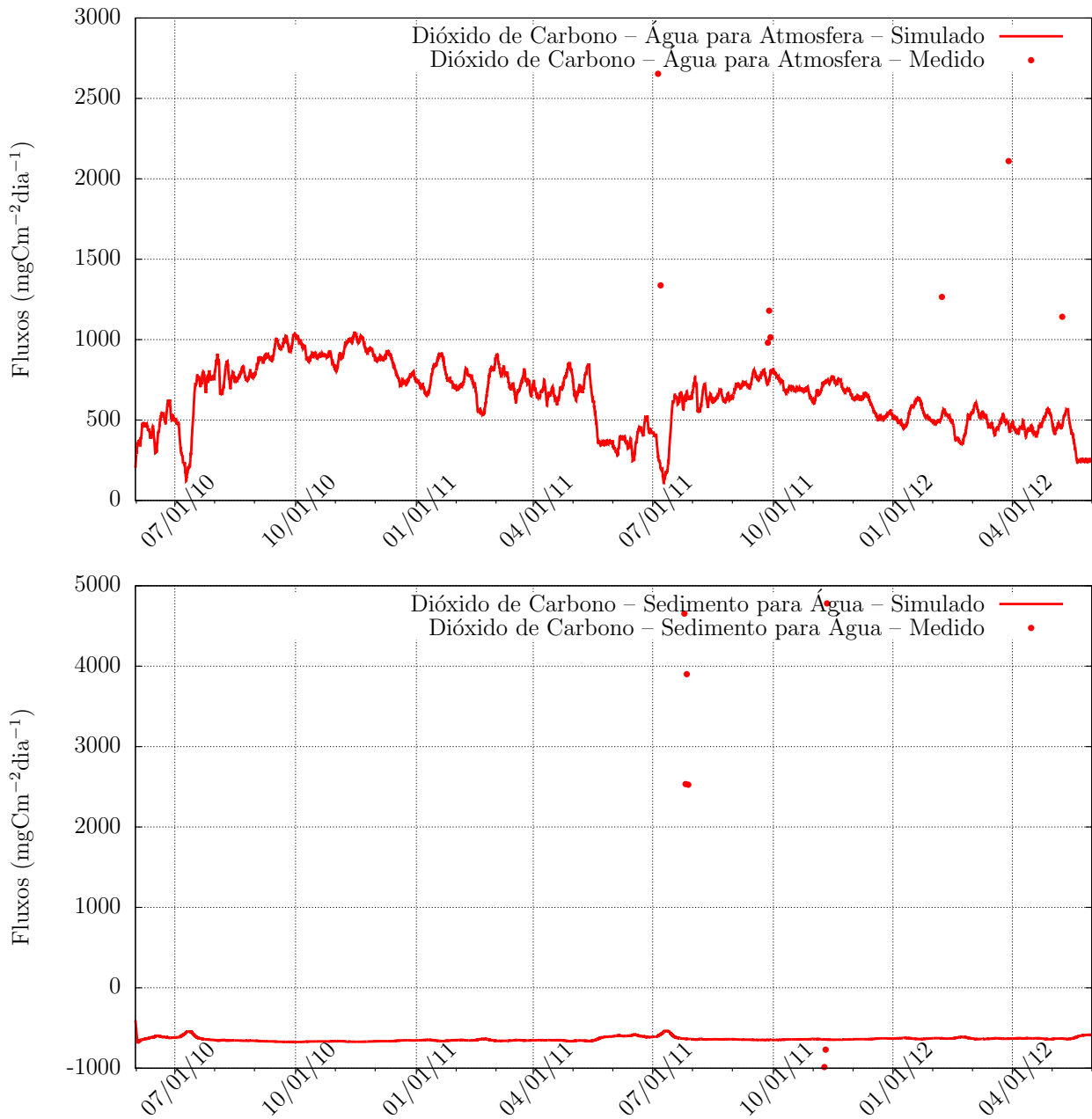


Figura 4.18: Fluxos de CO<sub>2</sub> da água para a atmosfera e do sedimento para a água comparados aos valores medidos para o reservatório de Funil. Quando os fluxos são positivos, estes são da água para a atmosfera ou do sedimento para água, caso contrário, são negativos.

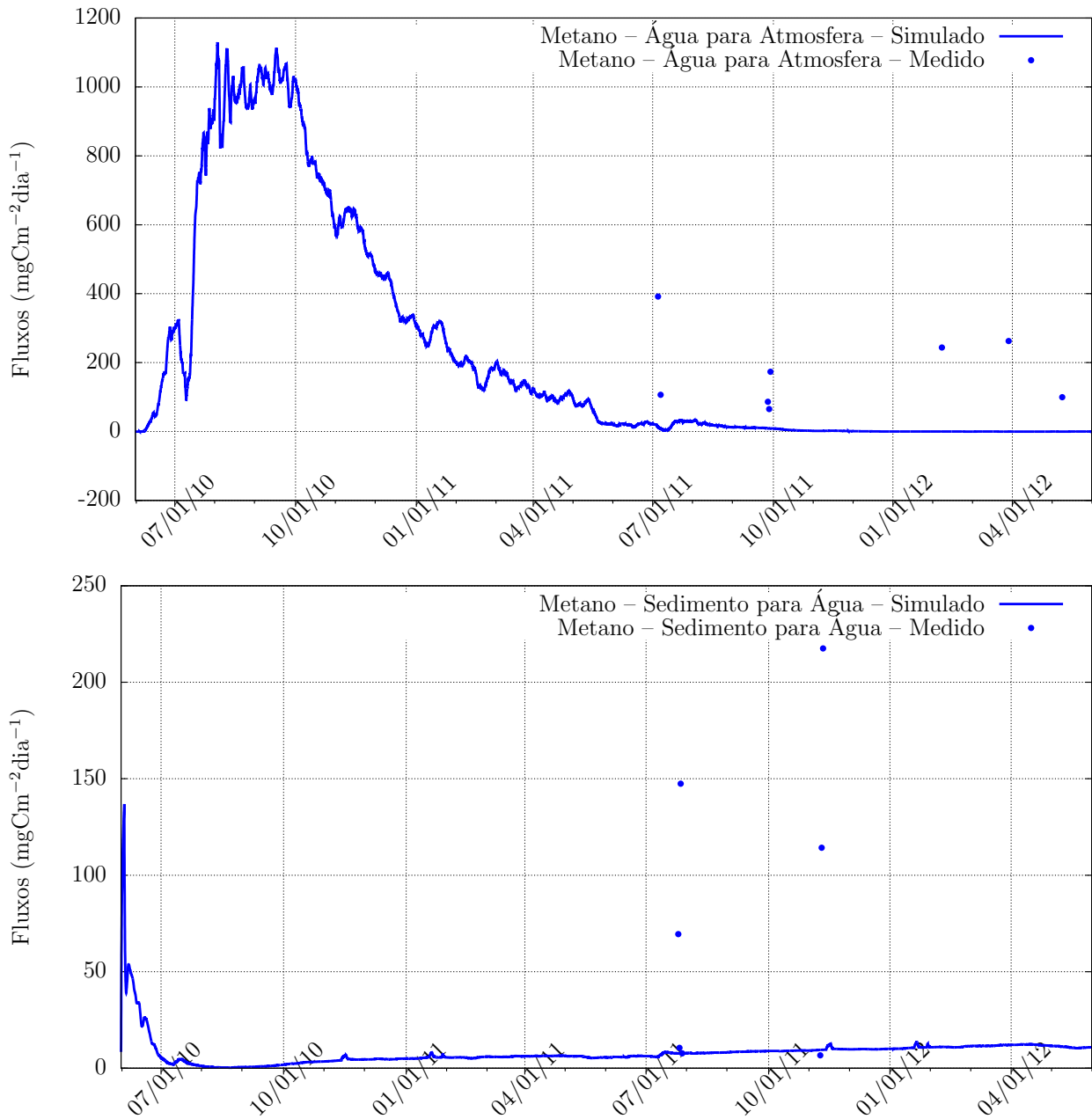


Figura 4.19: Fluxos de CH<sub>4</sub> da água para a atmosfera e do sedimento para a água comparados aos valores medidos para o reservatório de Funil. Quando os fluxos são positivos, estes são da água para a atmosfera ou do sedimento para água, caso contrário, são negativos.

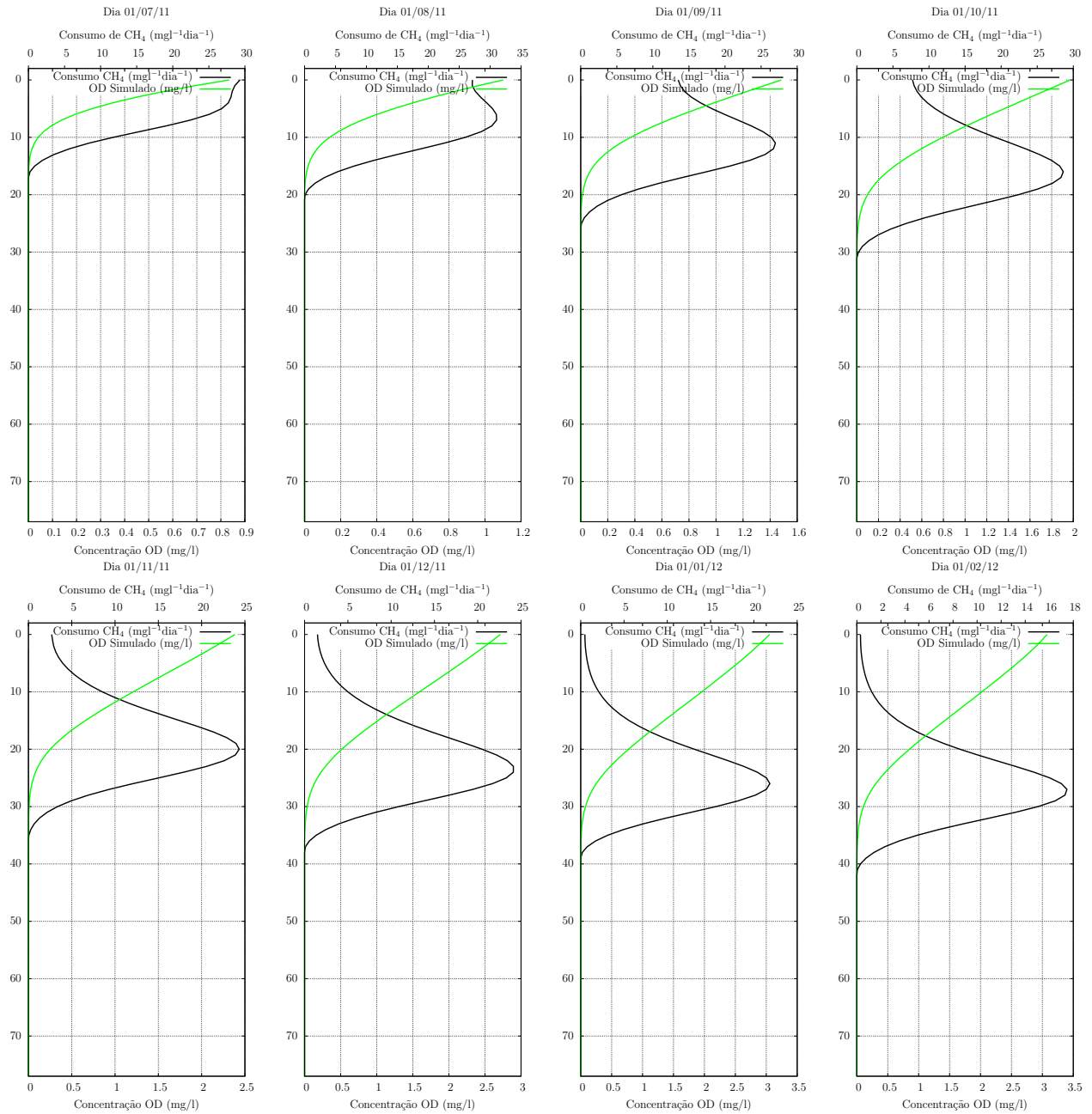


Figura 4.20: Consumo de metano obtido pelo modelo no reservatório de Funil.

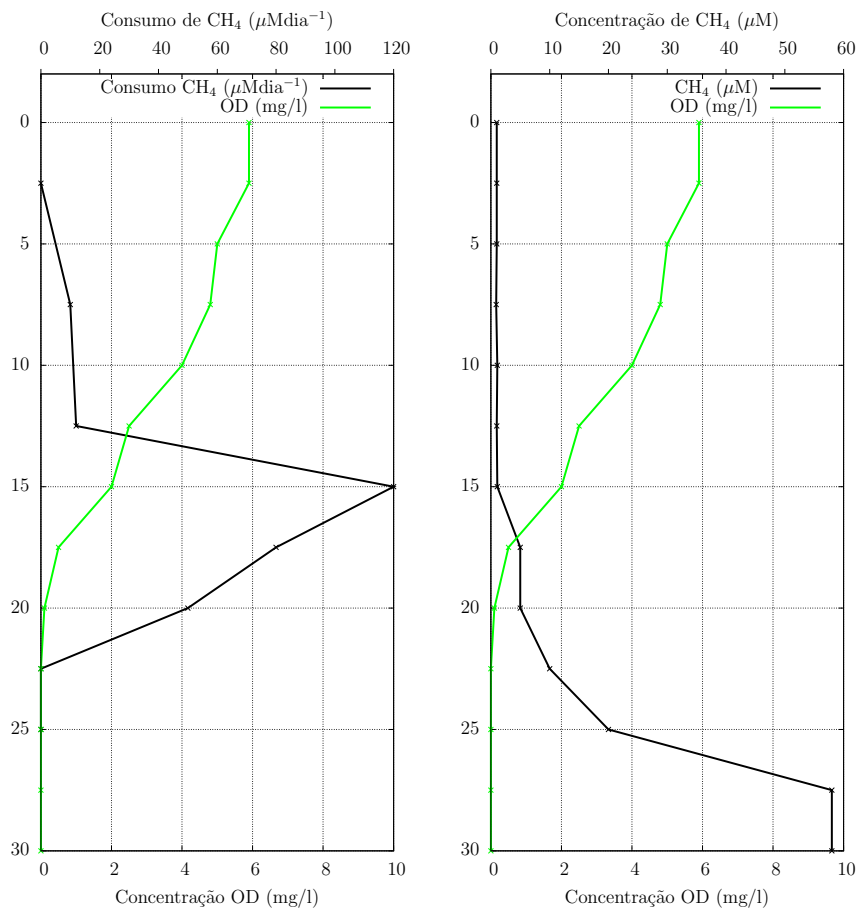


Figura 4.21: Consumo de metano observado por Carini et al. (2005) em Mono Lake (gráfico adaptado), no mês de abril de 2002. Na esquerda, o perfil de consumo de metano e concentração de OD e na direita, o perfil dos compostos neste dia.

## 4.2 Reservatório do Rio Verde

O reservatório do Rio Verde está localizado na região metropolitana de Curitiba, no município de Araucária e foi criado com o objetivo de abastecer a demanda da Refinaria Getúlio Vargas e a população do município. Possui área superficial de aproximadamente 5,9 km<sup>2</sup> com profundidade máxima de 10 metros (Cunha et al., 2011). Os dados meteorológicos utilizados para a simulação correspondem ao período de 01/03/2010 a 31/10/2010, medidos em uma estação próxima à barragem do lago. Os dados de vazão afluente foram medidos em três estações nos principais rios que alimentam o reservatório, em especial o Rio Verde. A localização do reservatório pode ser vista na figura 4.22.

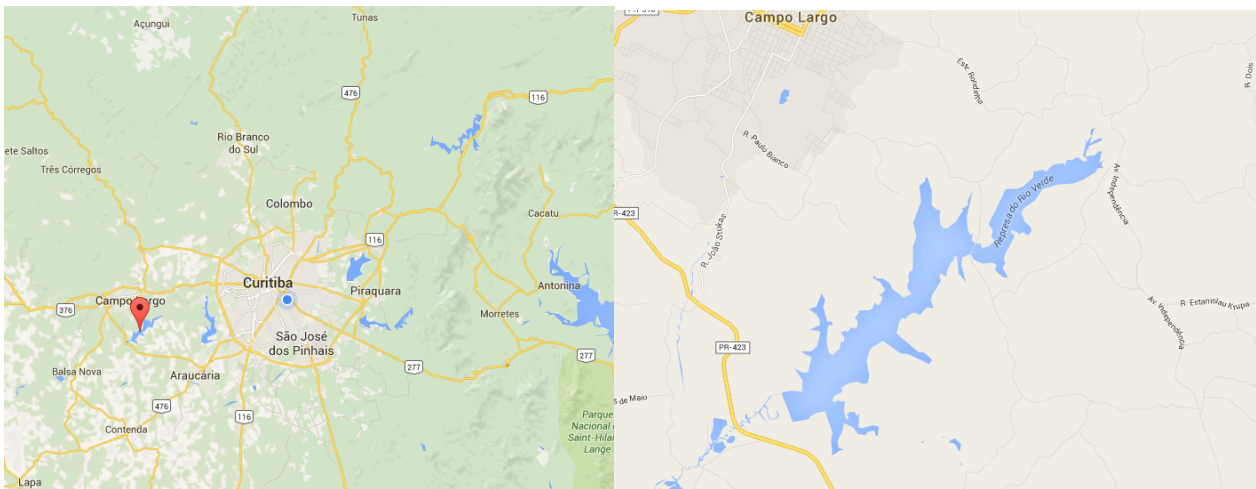


Figura 4.22: Reservatório do Rio Verde. Fonte: Google Maps.

### 4.2.1 Dados utilizados

Apesar de não haver dados de fluxos de GEE's medidos neste reservatório, foram feitas simulações a fim de se comparar os fluxos emitidos entre este e um reservatório de maior escala e profundidade e localizado em outra região climática brasileira, como é o caso do reservatório do Funil. Da mesma forma como foi feito na seção anterior, foram utilizados os seguintes tipos de dados:

- Meteorológicos: temperatura do ar, umidade relativa, velocidade do vento e radiação incidente. Estes dados foram medidos com frequência de 15 minutos em uma estação próxima à barragem do reservatório. Estes dados podem ser vistos na figura 4.23.



- Hidrológicos: vazões de entrada e saída. As vazões de entrada e saída foram consideradas e iguais (o que é razoável já que o reservatório do Verde não possui controle de vertimento) e dadas por 10 medições realizadas em dias específicos, os quais foram interpolados linearmente, conforme a figura 4.24.
- Biogeoquímicos: concentrações nos afluentes. As concentrações dos compostos biogeoquímicos nos afluentes foram consideradas as mesmas presentes no reservatório de Funil para melhor efeito comparativo, até porque estes dados não foram medidos para este período no reservatório do Verde. As condições iniciais para as concentrações no lago também foram adotadas como idênticas às do reservatório de Funil.

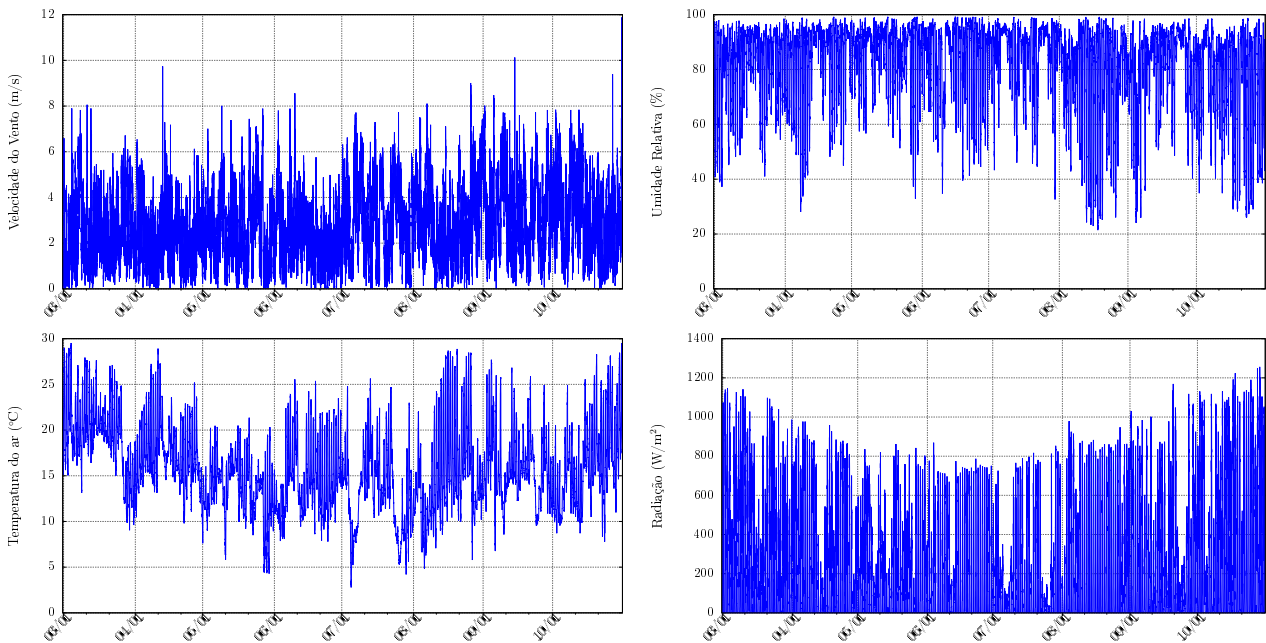


Figura 4.23: Variáveis meteorológicas utilizadas como forçantes para as simulações no período de 01/03/2010 a 31/10/2010 para o reservatório do Rio Verde.

Diferentemente do ocorrido na seção anterior, não é necessário proceder com a calibração do modelo de temperatura, já que o mesmo foi previamente ajustado no trabalho de da Silva (2014) para o período de junho de 2009 a dezembro de 2010, cujos parâmetros são  $c_1 = 2,82 \times 10^{-2}$ ,  $\sigma_1 = 0,7$ ,  $p = 1$ ,  $K_{Hmin} = 1,0 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ . Considera-se que, quando o coeficiente de difusão turbulenta atinge valor inferior a este, o mesmo é forçado ao valor de  $K_H = 2,5 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$  do ponto notado até o fundo do reservatório. Os perfis de temperatura medidos e simulados para este período podem ser vistos na figura 4.25.

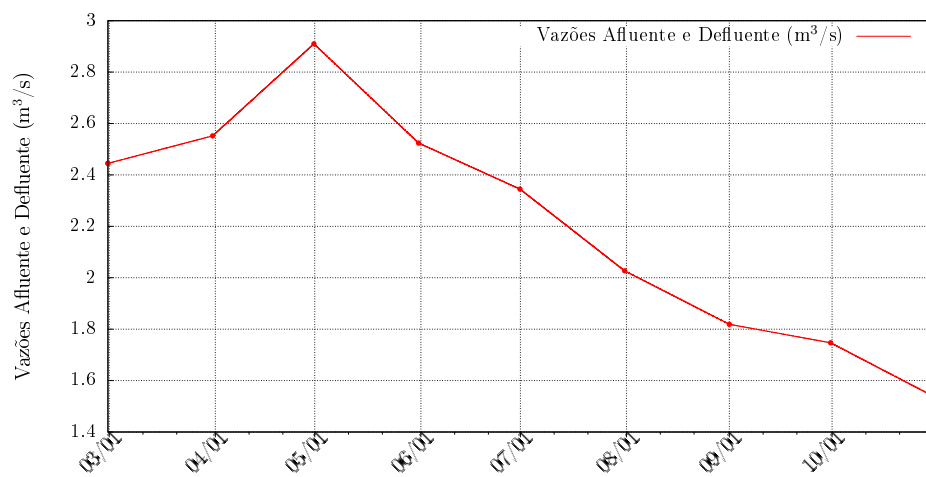


Figura 4.24: Vazão afluente e defluente no reservatório do Verde no período de 01/03/2010 a 31/10/2010.

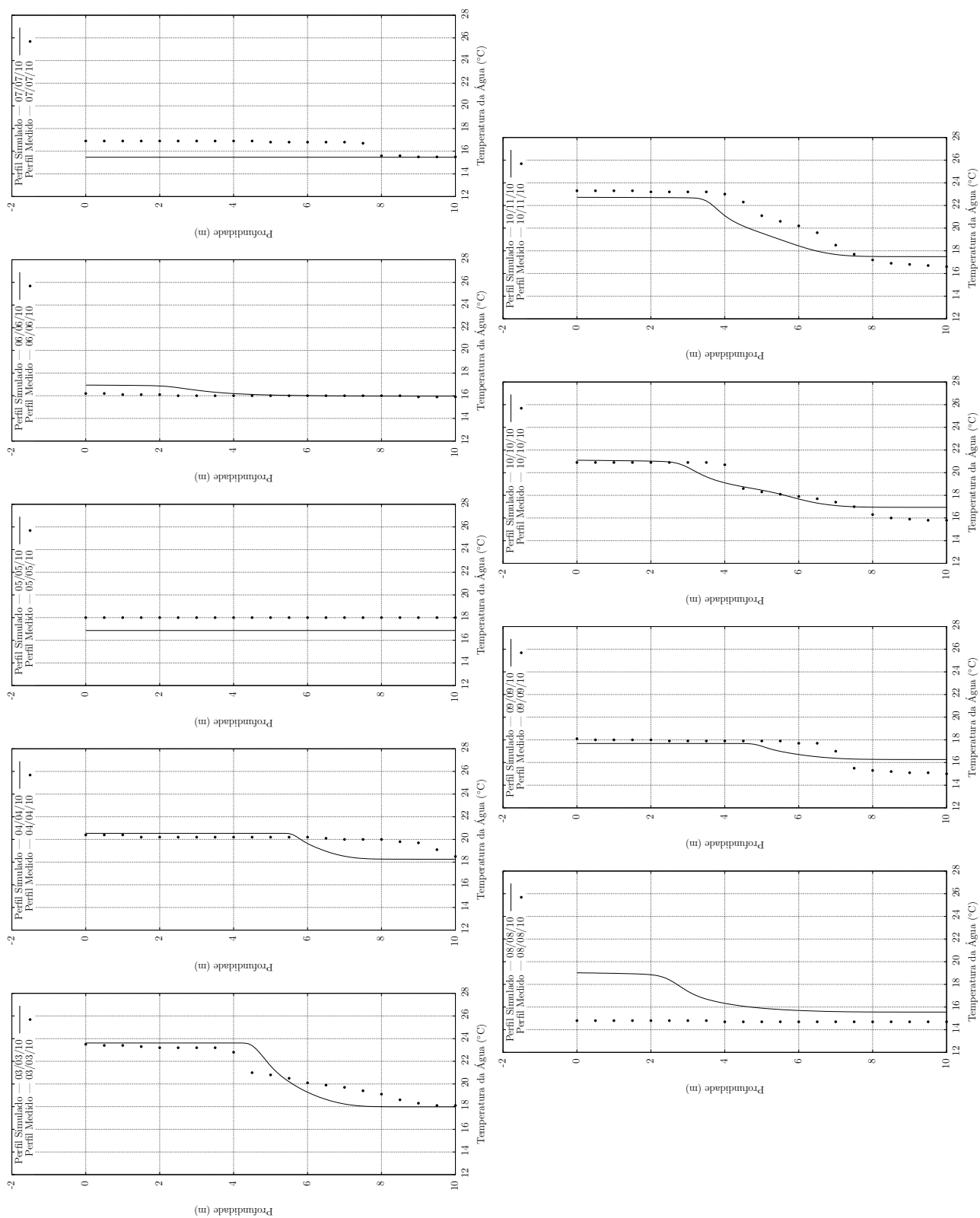


Figura 4.25: Perfis de temperatura na água medida e simulada no período de 03/2010 a 12/2010 no reservatório do Rio Verde.

## 4.2.2 Simulações

Tomando-se as considerações já citadas para as concentrações, uso dos dados meteorológicos e vazões, foi realizada uma simulação para o período de 01/03/2010 a 31/10/2010. O  $\Delta t$  e  $\Delta z$  utilizados foram de 100 segundos e 0,1 m, respectivamente e as janelas de médias móveis de 30 dias. Os parâmetros, taxas e constantes de qualidade da água também foram idênticos aos de Funil, conforme tabela 4.1. Os resultados para as concentrações simuladas na coluna d'água podem ser vistos juntamente com as temperaturas em forma de perfis na figura 4.26 para algumas datas, enquanto que os valores de fluxos de emissão de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> estão na figura 4.29. A temperatura e as concentrações médias na água podem ser vistas na figura 4.27. As concentrações nos sedimentos aeróbio e anaeróbio para os compostos modelados podem ser vistos na figura 4.28.

Com relação aos perfis gerados pode-se notar a capacidade do modelo em responder aos efeitos de estratificação de temperatura, como já havia sido demonstrado por da Silva (2014) e como foi visualizado na figura 4.25. Além disso, verifica-se uma boa resposta dos compostos (solutos) modelados aos efeitos de estratificação, ou seja, em meses de inverno em que ocorrem eventos de mistura nota-se uma distribuição uniforme das concentrações ao longo da profundidade do reservatório e quando existe uma termoclina bem pronunciada, nota-se a diferença nas concentrações dos compostos. Também verifica-se que o carbono orgânico dissolvido responde inversamente à disponibilidade de oxigênio dissolvido, já que em baixas concentrações deste segundo, haverá pouco consumo do primeiro pelas bactérias.

Nota-se que a formação de metano se dá exclusivamente pelo sedimento, já que para neste reservatório a concentração de OD nunca chega à zero, apesar de muito próximo, às vezes. Assim, como era de se esperar, as concentrações de metano são maiores em locais mais profundos. Uma situação interessante de se perceber para as concentrações de CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub> e COD é que enquanto há estratificação estes valores vão aumentando abaixo da termoclina e quando ocorre um evento de mistura, todos eles se uniformizam ao longo da coluna d'água. Isto, inclusive gera efeitos interessantes nos fluxos de metano e dióxido de carbono, discutidos a seguir.

Com relação aos fluxos de CO<sub>2</sub> nota-se que durante todo período houve liberação deste gás para a atmosfera, mostrando que em geral a coluna d'água apresentou grandes concentrações

deste gás. Nota-se que as emissões de  $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$  tendem a diminuir com o tempo e isso está de acordo com a vazão de entrada, onde se verificam os aportes de matéria orgânica. Pode-se verificar também alguns picos de emissão de  $\text{CO}_2$  e aparentemente eles estão atrelados à queda da temperatura média da água (períodos de mistura). Isso pode mostrar que, durante estes eventos, o composto aprisionado no hipolímnio tende a ser liberado para profundidades menores e conseqüentemente para a atmosfera. A mesma situação é vista no metano, inclusive, num período específico de maio, em que as concentrações estavam significativamente altas no hipolímnio e quando ocorreu a mistura, houve uma grande liberação do gás. No restante do período, o reservatório absorveu metano da atmosfera.

Da mesma forma que foi observado em Funil, aqui também foi possível reproduzir o comportamento observado por Carini et al. (2005) e Bastviken et al. (2002), relacionado ao alto consumo de metano pelas bactérias metanotróficas próximo à oxiclina. Na figura 4.30 é possível observar este comportamento obtido pelo modelo e novamente a figura 4.31 mostra uma representação de um dos perfis observados por estes autores. Nota-se, também, que no fundo do reservatório do Verde há um consumo grande de metano (não verificado nas medições dos autores) pois há uma (pequena) concentração de OD abaixo da oxiclina, que associada a uma grande concentração de  $\text{CH}_4$  gera um grande consumo, também.

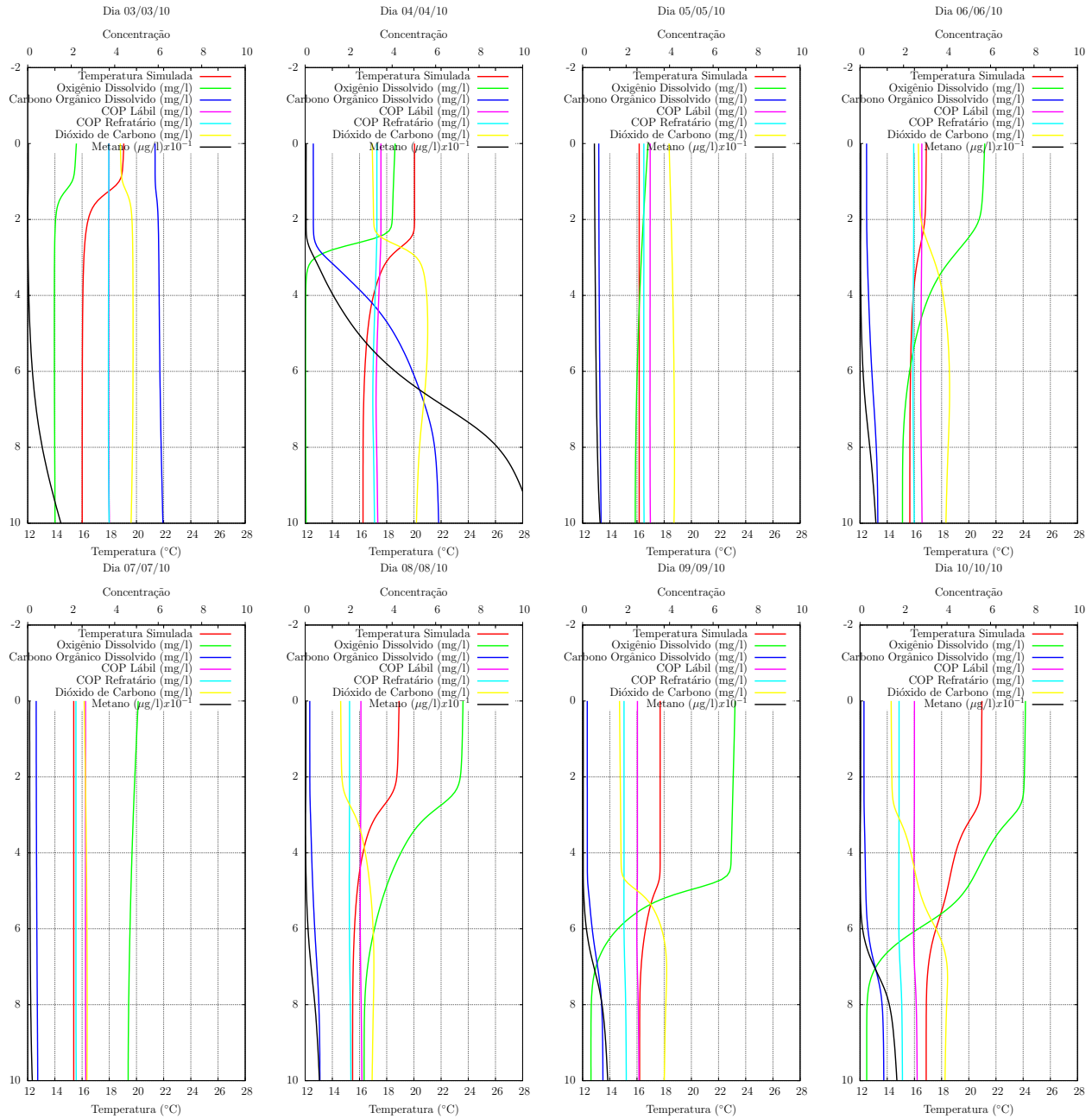


Figura 4.26: Perfis de temperatura e concentrações de oxigênio dissolvido, carbono orgânico particulado lábil e refratário, carbono orgânico dissolvido,  $\text{CO}_2$  dissolvido e  $\text{CH}_4$  dissolvido simulados para o período de 03/2010 a 10/2010 no reservatório do Rio Verde.

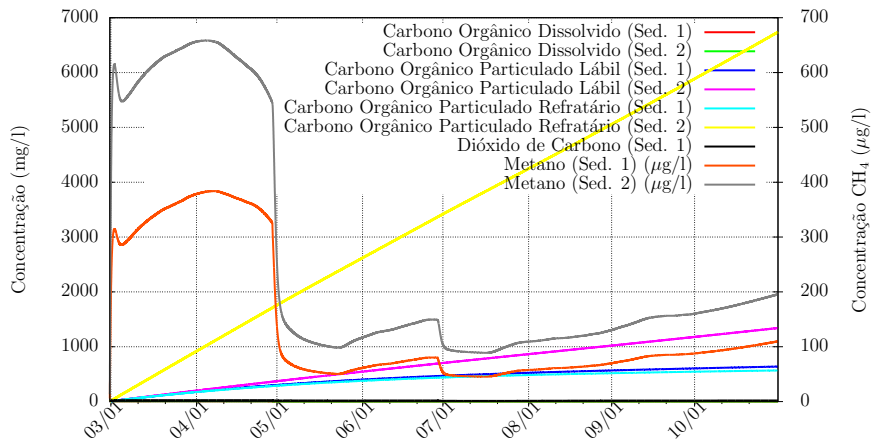


Figura 4.27: Concentrações simuladas de COD, COP lábil e refratário, CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> dissolvidos nos sedimento aeróbio (Sed. 1) e anaeróbio (Sed. 2) para o reservatório do Verde.

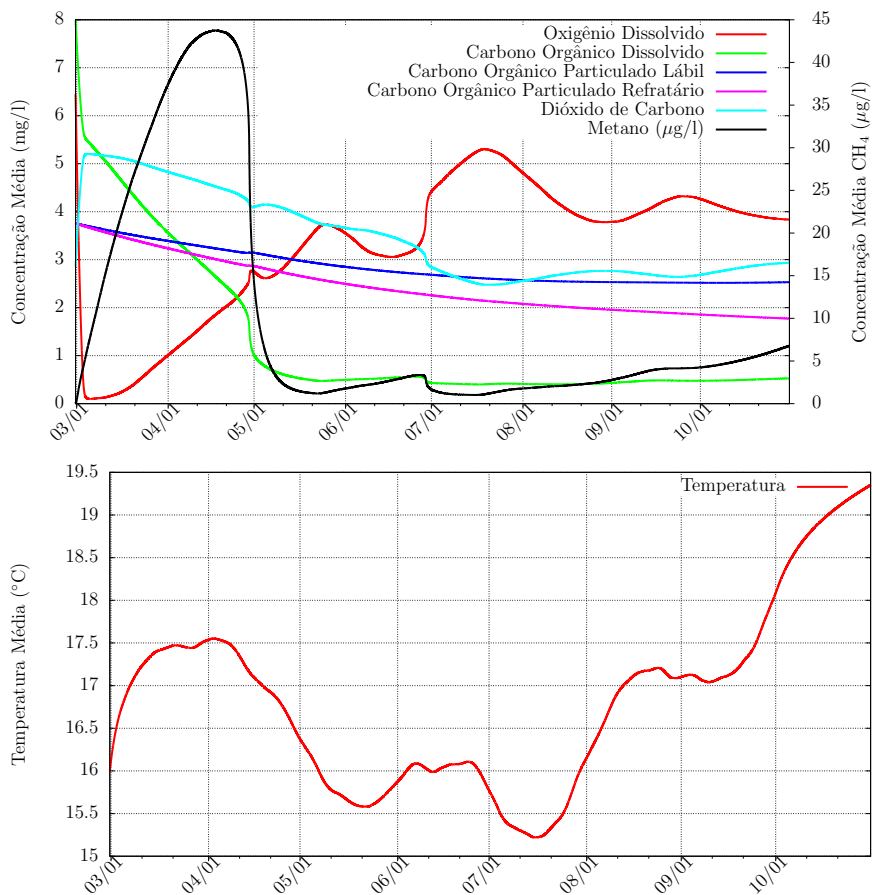


Figura 4.28: Temperatura e concentrações médias simuladas na água de OD, COD, COP lábil e refratário, CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> para o reservatório do Verde.

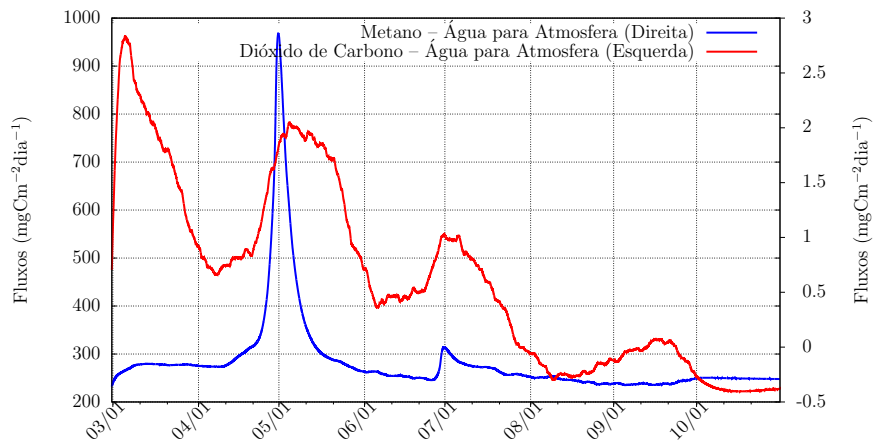


Figura 4.29: Fluxos de  $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$  da água para a atmosfera para o reservatório do Verde. Quando os fluxos são positivos, estes são da água para a atmosfera, caso contrário, são negativos.

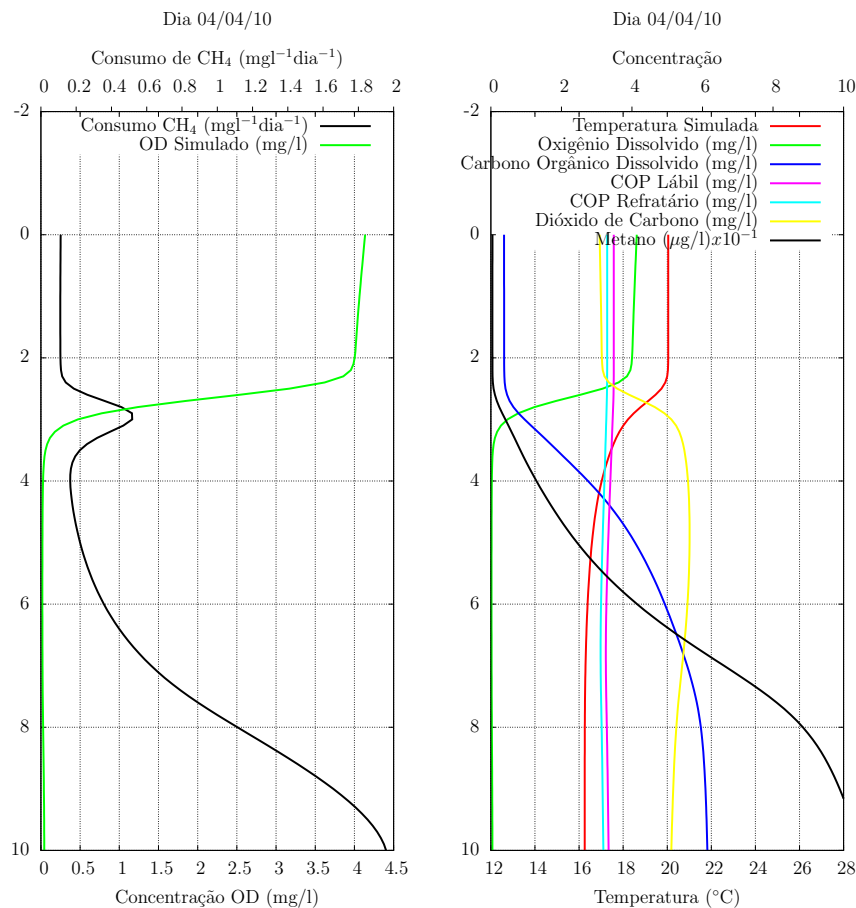


Figura 4.30: Consumo de metano obtido pelo modelo no reservatório do Verde. Na esquerda, o perfil de consumo de metano e concentração de OD e na direita, o perfil dos compostos e da temperatura neste dia.



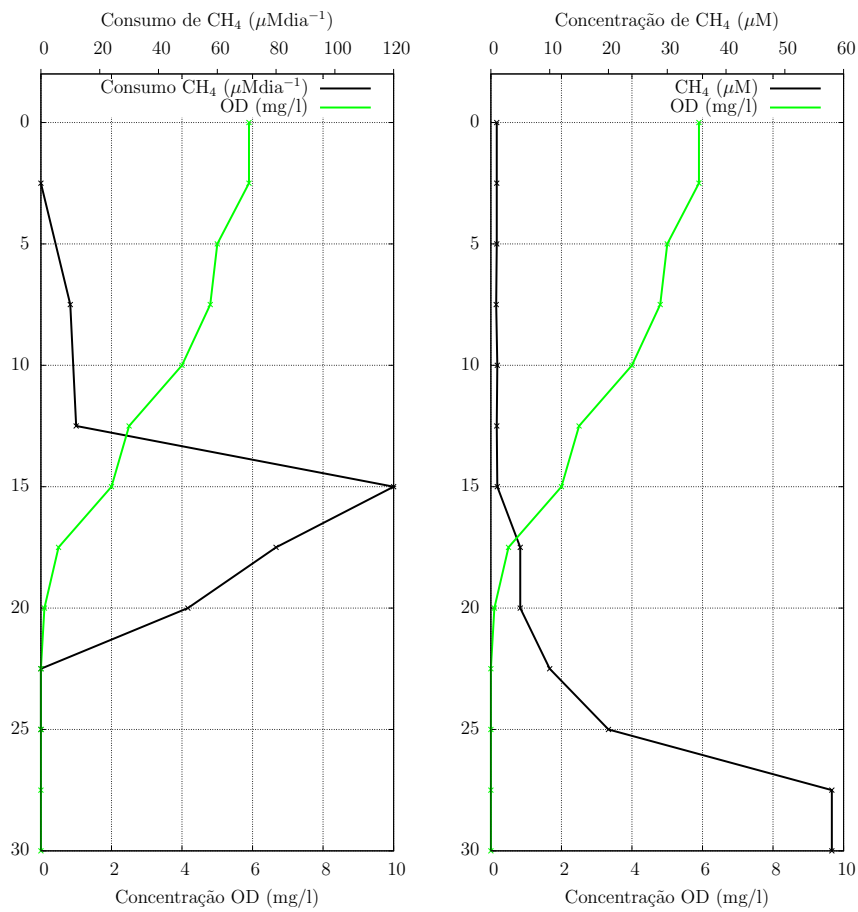


Figura 4.31: Consumo de metano observado por Carini et al. (2005) em Mono Lake (gráfico adaptado), no mês de abril de 2002. Na esquerda, o perfil de consumo de metano e concentração de OD e na direita, o perfil dos compostos neste dia.

## Capítulo 5

# Conclusões e Recomendações

Este trabalho teve por objetivo descrever as relações biogeoquímicas do ciclo do carbono em reservatórios, com a finalidade de estimar as emissões de gases de efeito estufa por estes corpos d'água, especialmente o dióxido de carbono e metano. Para isto, foram utilizadas metodologias específicas, como a visualização do reservatório como um sistema dividido em duas partes: a coluna d'água e o sedimento, sendo que na primeira considerou-se as variações verticais de temperatura e concentrações das espécies modeladas com o uso de equações diferenciais parciais e na segunda foi feita uma divisão em compartimentos aeróbio e anaeróbio, sendo cada um expresso por equações diferenciais ordinárias. Além disso, considerou-se como incógnitas do problema apenas os compostos do ciclo do carbono.

Com relação ao modelo de temperatura utilizado, notamos que este possui certa robustez, tanto para reservatórios profundos quanto rasos. Foi possível calibrar o modelo para o reservatório de Funil, com 77 metros de profundidade e para o Verde, significativamente mais raso, com 10 metros de profundidade máxima, como já havia sido demonstrado por da Silva (2014), apesar da metodologia solicitar ajuste de parâmetros de calibração.

A modelagem do ciclo do carbono pode apresentar certa simplicidade por considerar apenas os compostos: carbono orgânico particulado (lábil e refratário), dissolvido, oxigênio dissolvido, carbono inorgânico e metano, tanto para a coluna d'água quanto para o sedimento. Ainda assim, as respostas das concentrações e conseqüentemente dos fluxos de  $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$  estiveram de acordo com o esperado, respondendo corretamente às forçantes (vazões e concentrações afluentes e variáveis meteorológicas) para os dois reservatórios modelados, mesmo sem a modelagem

de todos os parâmetros de qualidade da água e sem qualquer calibração dos coeficientes e constantes necessários.

No reservatório de Funil, em que existem dados de fluxos medidos, foi possível comparar os resultados simulados. Pôde-se notar que os fluxos de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> não ficaram muito próximos dos valores medidos em campo e em alguns momentos, apenas na mesma ordem de grandeza, apesar de o modelo ter respondido bem aos fenômenos de estratificação de temperatura e as consequências deste nos perfis de concentração das substâncias modeladas. Também foi possível notar um comportamento condizente com as variações das forçantes meteorológicas, hidrológicas e biogeoquímicas. Já no reservatório do Verde, onde a estratificação foi mais pronunciada, foi possível notar o efeito deste fenômeno nas concentrações e conseqüentemente nas emissões de gases.

É interessante notar que ambos os reservatórios tiveram valores de emissão de CO<sub>2</sub> simulados muito próximos, sempre na faixa dos 200 a 1000 mgC m<sup>-2</sup>dia<sup>-1</sup>. Isto, obviamente, deve-se ao fato de que em ambos foram utilizadas as mesmas concentrações nos afluentes e foram consideradas vazões de entradas iguais às de saída (mas particulares para cada caso). Ou seja, isto pode nos dizer que o tamanho do reservatório (área e volume) pode não influenciar muito nos fluxos, apenas a emissão total, obviamente. Além disso, as diferenças de regiões climáticas não influenciaram muito na emissão, da mesma forma. No entanto, estes resultados não são suficientes para esta afirmação, sendo que algumas simulações comparativas com reservatórios em latitudes menores podem nos trazer resultados mais destoantes.

Finalmente, foi possível confirmar para os dois reservatórios o efeito do OD, e de sua estratificação, no consumo de metano por bactérias metanotróficas na coluna d'água. Foi possível, assim, reproduzir alguns resultados observados em outros lagos.

Algumas recomendações se fazem necessárias para futuros trabalhos. Primeiramente uma análise à metodologia de Henderson-Sellers (1985), que propõe uma forma de cálculo do coeficiente de difusão turbulenta independente de parâmetros de calibração, pode deixar o modelo mais genérico, especialmente em situações que se pretenda verificar a emissão de forma preditiva, ou seja, antes de uma possível inundação.

É importante, também, que se analise os fluxos no reservatório de Funil considerando-se as variações de nível no lago, já que o volume de água pode influenciar nas concentrações das

espécies, além de que variações na área superficial irão alterar as emissões totais de  $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$  além da quantidade de radiação absorvida.

A inserção de outras espécies na modelagem pode ajudar a tornar os resultados mais acurados, especialmente aquelas que afetam o crescimento do fitoplâncton, mas ainda é necessário se avaliar melhor os coeficientes associados ao ciclo de carbono, inclusive com medições destes em campo. Sugere-se como uma primeira espécie a ser inserida o fitoplâncton, pois como pôde ser visto na seção 3.2.1, os parâmetros relacionados à esta espécie foram os que mais influenciaram nas concentrações de dióxido de carbono, metano e oxigênio dissolvido.

Uma comparação dos resultados com um modelo concentrado (sem variações espaciais) pode mostrar o ganho real do uso desta metodologia, que deve ser mais acurada, apesar de mais custosa computacionalmente.

# Referências Bibliográficas

- Aberg, J., Bergstrom, A., Algesten, G., Soderback, K., e Jansson, M. (2004). A comparison of the carbon balances of a natural lake (L. Ortrasket) and a hydroelectric reservoir (L. Skinnmuddselet) in northern Sweden. *Water Research*, 38:531–538.
- Baird, C. (2002). *Química Ambiental*. Bookman, 2<sup>a</sup> ed.
- Bastviken, D., Ejlertsson, J., e Tranvik, L. (2002). Measurement of Methane Oxidation in Lakes: A Comparison of Methods. *Environ. Sci. Technol.*, 36:3354–3361.
- Bowie, G. L., Mills, W. B., Porcella, D. B., , Campbell, C. L., Pagenkopf, J. R., Rupp, G. L., Johnson, K. M., Chan, P. W. H., e Gherini, S. A. (1985). *Rates, Constants, and Kinetics Formulations in Surface Water Quality Modeling (Second Edition)*.
- Brasil, M. d. M. e. E. (2014). *Emissões de Gases de Efeito Estufa em Reservatórios de Centrais Hidrelétricas*. Sindicato Nacional dos Editores de Livros.
- Cancelli, D. M. (2006). Um modelo para a evolução térmica em lagos profundos. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Paraná, Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia.
- Carini, S., Bano, N., LeCleir, G., e Joye, S. B. (2005). Aerobic methane oxidation and methanotroph community composition during seasonal stratification in Mono Lake, California (USA). *Environmental Microbiology*, 7(8):1127–1138.
- Chapra, S., Pelletier, G., e Tao, H. (2008). *QUAL2K: A Modeling Framework for Simulating River and Stream Water Quality (Version 2.11)*.
- Chapra, S. C. (1997). *Surface Water-Quality Modeling*. WCB McGraw-Hill.

- Chen, H., Wu, Y., Yuan, X., Gao, Y., Wu, N., e Zhu, D. (2009). Methane emissions from newly created marshes in the drawdown area of the Three Gorges Reservoir. *Journal of Geophysical Research-Atmospheres*, 114:0148–0227.
- Cole, T. M. e Wells, S. A. (2015). *CE-QUAL-W2: A Two-Dimensional, Laterally Averaged, Hydrodynamic and Water Quality Model, Version 3.72 — User Manual*. U.S. Army Corps of Engineers and Portland State University.
- Cunha, C. L. N., Carneiro, C., Gobbi, E. F., e Andreoli, C. V. (2011). *Eutrofização em Reservatórios: Gestão Preventiva – Estudo Interdisciplinar na Bacia do Rio Verde, PR*. Editora UFPR, 1ª ed.
- da Silva, T. O. (2014). Modelagem Numérica da Estratificação Térmica Vertical de Reservatórios. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Paraná, Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental — PPGEA.
- di Toro, D. M. (2001). *Sediment Flux Modeling*. Environmental Science and Technology. Wiley-Interscience.
- Diem, T., Koch, S., Schwarzenbach, S., Wehrli, B., e Schubert, C. (2007). Greenhouse-gas (CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub>) emissions from hydroelectric reservoirs in Switzerland.
- dos Santos, M. A., Rosa, L. P., Sikar, B., Sikar, E., e dos Santos, E. O. (2006). Gross greenhouse gas fluxes from hydro-power reservoir compared to thermo-power plants. *Energy Policy*, 34:481–488.
- EPA, U. S. E. P. A. (2013). River and Stream Water Quality Model (QUAL2K). Acesso em: 01 de julho de 2015.
- EPA, U. S. E. P. A. (2015). CE-QUAL-W2 — Model Description. Acesso em: 01 de julho de 2015.
- Fearnside, P. M. (1995). Hydroelectric dams in the Brazilian amazon as sources of greenhouse gases. *Environmental Conservation*, 22:7–19.

- Fearnside, P. M. (1997). Greenhouse-gas emissions from Amazonian hydroelectric reservoirs: the example of Brazil's Tucuruí Dam as compared to fossil fuel alternatives. *Environmental Conservation*, 24:64–75.
- Fearnside, P. M. (2002). Greenhouse gas emissions from a hydroelectric reservoir (Brazil's Tucuruí Dam) and the energy policy implications. *Water Air and Soil Pollution*, 133:69–96.
- Fearnside, P. M. (2005). Do hydroelectric dams mitigate global warming? The case of Brazil's Curuá-Una dam. *Mitigation and Adaptation Strategies for Global Change*, 66:1–8.
- Fortuna, A. d. O. (2000). *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos básicos e aplicações*. Edusp.
- Furnas (2016). Sistema Furnas de Geração e Transmissão – Parque Gerador – Usina hidrelétrica de Funil. [http://www.furnas.com.br/hotsites/sistemafurnas/usina\\_hidr\\_funil.asp](http://www.furnas.com.br/hotsites/sistemafurnas/usina_hidr_funil.asp). Acesso em: 03 de maio de 2016.
- Gagnon, L. e de Vate, J. F. V. (1997). Greenhouse gas emissions from hydropower - The state of research in 1996. *Energy Policy*, 25:7–13.
- Galy-Lacaux, C., Delmas, R., Jambert, C., Dumestre, J., Labroue, L., Richard, S., e Gosse, P. (1997). Gaseous emissions and oxygen consumption in hydroelectric dams: A case study in French Guyana. *Global Biogeochemical Cycles*, 11:471–483.
- Galy-Lacaux, C., Delmas, R., Kouadio, G., Richard, S., e Gosse, P. (1999). Long-term greenhouse gas emissions from hydroelectric reservoirs in tropical forest regions. *Global Biogeochemical Cycles*, 13:503–517.
- Hanson, P. C., Pollard, A. I., Bade, D. L., Predick, K., Carpenter, S. R., e Foley, J. A. (2004). A model of carbon evasion and sedimentation in temperate lakes. *Global Change Biology*, 10(8):1285–1298.
- Henderson-Sellers, B. (1984). *Engineering Limnology*. Pitman Advanced Publishing Program.
- Henderson-Sellers, B. (1985). New formulation of eddy diffusion thermocline models. *Appl. Math. Modelling*, 9:441–446.

- Hoeltgebaum, L. E. B. e Gobbi, M. F. (2015). Modelagem de Emissão de Gases de Efeito Estufa por Reservatórios. *XXI Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos*.
- Houghton, J. (1997). *Global Warming — The Complete Briefing*. Cambridge University Press, 2<sup>th</sup> ed.
- Huttunen, J., Vaisanen, T., Hellsten, S., Heikkinen, M., Nykanen, H., Jungner, H., Niskanen, A., Virtanen, M., Lindqvist, O., Nenonen, O., e Martikainen, P. (2002). Fluxes of CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub>, and N<sub>2</sub>O in hydroelectric reservoirs Lokka and Porttipahta in the northern boreal zone in Finland. *Global Biogeochemical Cycles*. *Global Biogeochemical Cycles*, 16.
- Keller, M. e Stallard, R. (1997). Methane Emission by Bubbling from Gatun Lake, Panama. *Journal of Geophysical Research-Atmospheres*, 99:8307–8319.
- Le Yana, Lu, F., Zhou, X., Wang, X., Duan, X., e Sun, B. (2014). Progress in the studies on the greenhouse gas emissions from reservoirs. *Acta Ecologica Sinica*, 34:204–212.
- Leonard, B. P. (1991). The ULTIMATE conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 88(1):17–74.
- Mendonça, R., Barros, N., Vidal, L. O., Pacheco, F., Kosten, S., e Roland, F. (2012). *Greenhouse Gases – Emission, Measurement and Management*, Capítulo 3 — Greenhouse Gas Emissions from Hydroelectric Reservoirs: What Knowledge Do We Have and What is Lacking?, páginas 55 – 78. InTech.
- Männich, M. (2013). *Estimativa de emissões de gases de efeito estufa em reservatórios e lagos — contribuições para o monitoramento e modelagem 1D - vertical*. Tese de doutorado, Universidade Federal do Paraná, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental.
- Männich, M., Resende, J. F., Fernandes, C. V. S., Bernardo, J. W. Y., Zahn, E., e Bleninger, T. B. (2015). CICLAR: Modelo 0D para Dinâmica de Carbono em Lagos e Reservatórios. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, 20:237–248.



- NOAA (2015). National Oceanic and Atmospheric Administration. <http://www.ncdc.noaa.gov/monitoring-references/faq/greenhouse-gases.php>. Acesso em 04 de Dezembro de 2015.
- Polli, B. A. (2014). Modelagem 1D do fluxo vertical de calor em corpos de água horizontalmente homogêneos. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Paraná, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental.
- Roland, F., Vidal, L. O., Pacheco, F. S., Barros, N. O., Assireu, A., Ometto, J. P. H. B., Cimblaris, A. C. P., e Cole, J. J. (2010). Variability of carbon dioxide flux from tropical (Cerrado) hydroelectric reservoirs. *Aquatic Sciences*, 72:283–293.
- Rosa, L. e Schaeffer, R. (1994). Greenhouse-Gas Emissions from Hydroelectric Reservoirs. *Ambio*, 23:164–165.
- Rosa, L. P., dos Santos, M. A., Matvienko, B., dos Santos, E. O., e Sikar, E. (2004). Greenhouse Gas Emissions from Hydroelectric Reservoirs in Tropical Regions. *Energy Policy*, 66:9–21.
- Rosman, P. C. C. (2012). *SisBaHiA — Sistema Base Hidrodinâmica Ambiental*. COPPE — Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- Rudd, J. e Taylor, C. (1980). Methane cycling in aquatic environments. *Adv Aquat Microbiol*, 2:77–150.
- Sharifi, A., Kalin, L., Hantush, M. M., Isik, S., e Jordan, T. E. (2013). Carbon dynamics and export from flooded wetlands: A modeling approach. *Ecological Modelling*, 263:196–210.
- Smith, G. D. (1965). *Numerical solution of partial differential equations*. Oxford University Press.
- Soumis, N., Duchemin, E., Canuel, R., e Lucotte, M. (2004). Greenhouse gas emissions from reservoirs of the western United States. *Global Biogeochemical Cycles*, 18.
- Sundaram, T. R. e Rehm, R. G. (1971). Formation and maintenance of thermoclines in temperate lakes. *AIAA Journal*, 9(7):1322–1329.

- Teodoru, C. R., Prairie, Y. T., e del Giorgio, P. A. (2010). Spatial Heterogeneity of Surface CO<sub>2</sub> Fluxes in a Newly Created Eastmain-1 Reservoir in Northern Quebec, Canada. *Ecosystems*, 14:28–46.
- Thomann, R. V. e Mueller, J. A. (1987). *Principles of Surface Water Quality Modeling and Control*. HarperCollinsPublishers Inc.
- Tremblay, A., Lambert, M., e Gagnon, L. (2004). Do Hydroelectric Reservoirs Emit Greenhouse Gases? *Environmental Management*, 33:509–517.
- Utsumi, M., Nojiri, Y., Nakamura, T., Nozawa, T., Otsuki, A., Takamura, N., Watanabe, M., e Seki, H. (1998). Dynamics of dissolved methane and methane oxidation in dimictic Lake Nojiri during winter. *Lunol. Oceanogr.*, 43:10–17.
- Vörösmarty, C. J., Meybeck, M., Fekete, B., Sharma, K., Green, P., e Syvitski, J. P. (2003). Anthropogenic sediment retention: major global impact from registered river impoundments. *Global and Planetary Change*, 39:169–190.
- Wanninkhof, R., Ledwell, J. R., e Crusius, J. (1991). Gas Transfer Velocities on Lakes Measured with Sulfur Hexafluoride. In *Symposium Volume of the Second International Conference on Gas Transfer at Water Surfaces*.
- Weissenberger, S., Lucotte, M., Houel, S., Soumis, N., Éric Duchemin, e Canuel, R. (2010). Modeling the carbon dynamics of the La Grande hydroelectric complex in northern Quebec. *Ecological Modelling*, 221:610–620.
- Zahn, E., Mannich, M., e Fernandes, C. V. S. (2013). Modelo matemático zero-dimensional para estimativa de emissões de gases de efeito estufa em reservatórios. *XX Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos*.
- Zheng, H., Zhao, X., Zhao, T., Chen, F., Xu, W., Duan, X., Wang, X., e Z.Y., O. (2011). Spatial-temporal variations of methane emissions from the Ertan hydroelectric reservoir in southwest China. *Journal of Geophysical Research-Atmospheres*, 25:1391–1396.

# Apêndice A

## Considerações sobre o modelo de temperatura

### A.1 Condição de Contorno

As condições de contorno no fundo e na superfície são dadas, respectivamente, pelas equações (A.1) e (A.2):

$$\rho_W c (K_M + K_H(0, t)) \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0 \quad (\text{A.1})$$

$$\rho_W c (K_M + K_H(0, t)) \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0} = H_n = K(T_e - T_s) \quad (\text{A.2})$$

em que  $\rho_W$  é a densidade ( $\text{kg m}^{-3}$ ) e  $c_p$  o calor específico da água ( $\text{J Kg}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ ),  $K_H$  e  $K_M$  são os coeficientes de difusão turbulenta e molecular para a temperatura ( $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ ) e  $H_n$  é o balanço de energia entre o corpo d'água e a superfície da água ( $\text{W m}^{-2}$ ), cuja temperatura é representada por  $T_s$  ( $^\circ\text{C}$ ). A temperatura de equilíbrio é dada por  $T_e$  ( $^\circ\text{C}$ ) e  $K$  é o coeficiente de troca de calor ( $\text{Wm}^{-2}\text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ ), dado por:

$$K = -\frac{\partial H_n}{\partial T_s} = -\left(\frac{\partial H_b}{\partial T_s} + \frac{\partial H_e}{\partial T_s} + \frac{\partial H_c}{\partial T_s}\right) \quad (\text{A.3})$$

em que  $H_b$ ,  $H_e$  e  $H_c$  são respectivamente a perda de radiação por onda longa pela superfície da água ( $\text{W m}^{-2}$ ), a perda de energia por evaporação (calor latente) e a perda/ganho de calor sensível.  $H_n$ , por sua vez, é soma de todas as trocas de radiação entre o corpo d'água e a atmosfera ( $\text{W m}^{-2}$ ), dado por:

$$H_n = H_s + H_a + H_b + H_e + H_c \quad (\text{A.4})$$

em que  $H_a$  é a radiação de onda longa emitida pela atmosfera e absorvida pelo corpo d'água ( $\text{W m}^{-2}$ ) e  $H_s$  é a radiação de onda curta absorvida pelo corpo d'água ( $\text{W m}^{-2}$ ).

## A.2 Coeficiente de Difusão Turbulenta

O coeficiente de difusão turbulenta ( $K_H$ ) dado por Sundaram e Rehm (1971) é descrito como:

$$K_H = K_{H_0} f(R_i) \quad (\text{A.5})$$

$$K_{H_0} = c_1 u_* \quad (\text{A.6})$$

$$f(R_i) = (1 + \sigma_1 R_i)^{-p} \quad (\text{A.7})$$

$$R_i = -\frac{g \alpha_\nu k^2 z^2}{u_*^2} \frac{\partial T}{\partial z} \quad (\text{A.8})$$

em que  $K_{H_0}$  é o coeficiente de difusão turbulenta para o estado neutro, ou seja, quando não há mistura forçada por gradientes de temperatura na água e  $f(R_i)$  é uma função do número de Richardson ( $R_i$ ), que dá o estado de estabilidade do corpo d'água como função de sua densidade (que por sua vez é função da temperatura).  $c_1$ ,  $\sigma_1$  e  $p$  são parâmetro de ajuste/calibração,  $g$  a gravidade,  $\alpha_\nu$  o coeficiente de expansão volumétrica da água,  $k$  a constante de von Karman,  $z$

a profundidade (m) e  $u_*$  a velocidade de atrito causada pelo vento ( $\text{m s}^{-1}$ ).

Já, segundo Henderson-Sellers (1985), é possível se utilizar de uma formulação para o coeficiente de difusão turbulenta que não necessita de calibração, entrando-se apenas com a latitude ( $\phi$ ) onde se encontra o corpo d'água.

$$K_H = K_{H_0} f(R_i) \quad (\text{A.9})$$

$$K_{H_0} = \frac{ku_*z}{P_0} \exp(-k^*z) \quad (\text{A.10})$$

$$k^* = 6,6\sqrt{\sin\phi}U^{-1,84} \quad (\text{A.11})$$

$$f(R_i) = (1 + 37R_i)^{-1} \quad (\text{A.12})$$

$$R_i = \frac{-1 + \sqrt{1 + \frac{40N^2k^2z^2}{u_*^2 \exp(-2k^*z)}}}{20} \quad (\text{A.13})$$

em que  $k^*$  é o parâmetro de Ekman,  $P_0$  é o valor neutro do número de Prandtl turbulento,  $U$  é a velocidade do vento ( $\text{m s}^{-1}$ ) e  $N^2$  é a frequência de Brunt-Väisälä ( $\text{s}^{-2}$ ).

### A.3 Discretização e Solução Numérica

A forma de discretização para a equação da temperatura (3.1) é a mesma apresentada no trabalho de da Silva (2014), utilizado-se o método numérico de diferenças finitas Crank Nicolson.